



(12)

Veröffentlichung

der internationalen Anmeldung mit der
(87) Veröffentlichungs-Nr.: **WO 2011/006353**
in deutscher Übersetzung (Art. III § 8 Abs. 2 IntPatÜG)
(21) Deutsches Aktenzeichen: **11 2010 002 628.9**
(86) PCT-Aktenzeichen: **PCT/CN2010/001052**
(86) PCT-Anmeldetag: **14.07.2010**
(87) PCT-Veröffentlichungstag: **20.01.2011**
(43) Veröffentlichungstag der PCT Anmeldung
in deutscher Übersetzung: **14.06.2012**

(51) Int Cl.: **C07F 1/12 (2012.01)**
H05B 33/14 (2012.01)

(30) Unionspriorität:
61/225,333 **14.07.2009** **US**

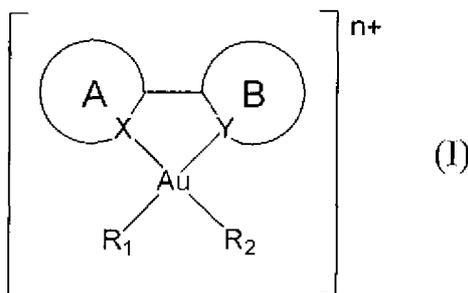
(71) Anmelder:
The University of Hong Kong, Hongkong, CN

(74) Vertreter:
Patentanwälte Ruff, Wilhelm, Beier, Dauster & Partner, 70174, Stuttgart, DE

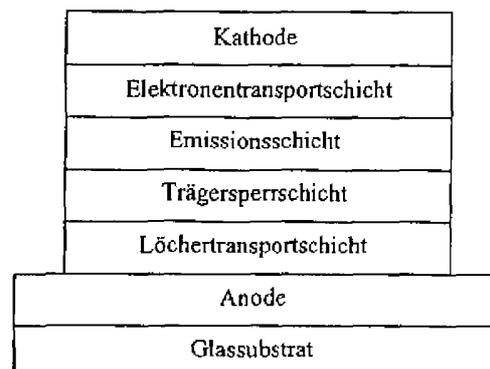
(72) Erfinder:
YAM, Wingwah Vivian, Hong Kong, CN; CHAN, Meiyee, Hong Kong, CN; AU, Kaman Vonika, Hong Kong, CN; WONG, Manchung Keith, Hong Kong, CN

(54) Bezeichnung: **Lumineszierende Gold (III)-Verbindungen, die bidentate Liganden enthalten, für organische Leuchtelemente und ihre Herstellurig**

(57) Zusammenfassung: Ausführungsformen der Erfindung sind auf lumineszierende Gold(III)-Verbindungen, die einen bidentaten Liganden mit mindestens einer starken σ -Donatorgruppe enthalten, ein Verfahren zur Herstellung dieser Verbindungen und die Verwendung dieser Verbindungen in organischen Leuchtelementen gerichtet. Die Gold(III)-Verbindungen weisen die chemische Struktur auf:



worin: K ein Stickstoffatom ist, Y ausgewählt ist aus einem Kohlenstoff- oder einem Stickstoffatom, A-B ein substituierter oder unsubstituierter Cyclometallatligand (für Y=C) oder Diiminligand (für Y=N) ist, wobei A und B cyclische Strukturderivate sind, R₁ und R₂ optional substituierte Kohlenstoffdonorliganden sind, die am Goldatom angelagert sind, mit der Voraussetzung, dass R₁ und R₂ nicht -CH₃, -CH₂SiMe₃, Mesityl, Pentafluorphenyl, -CH₂C(O)R', -CH(R)SO₂CH(R)-, -C₆H₄N=NC₆H₅ sind, und worin R₁ und R₂ optional zu einem bidentaten Liganden kombiniert sein können, und n größer oder gleich Null ist



Beschreibung

QUERVERWEIS ZU EINER VERWANDTEN ANMELDUNG

[0001] Die vorliegende Anmeldung beansprucht die Priorität der zuvor am 14. Juli 2009 in den USA angemeldeten U.S. Provisional Application mit dem Aktenzeichen 61/225,333, die durch Bezugnahme in vollem Umfang zum Inhalt dieser Anmeldung gemacht wird.

BEREICH DER ERFINDUNG

[0002] Ausführungsformen der Erfindung sind auf eine neue Klasse von Gold(III)-Verbindungen, die einen bidentaten Liganden mit zwei starken σ -Donatorgruppen enthalten, und die Synthese dieser Verbindungen gerichtet. Diese Verbindungen können als Licht emittierendes Material in auf Phosphoreszenz basierenden organischen Leuchtelementen (OLEDs, Organic Light-Emitting Devices) verwendet werden.

HINTERGRUND DER ERFINDUNG

[0003] In den letzten Jahren wurde der Forschung und Entwicklung von organischen Leuchtelementen (Lichtemissionselementen) viel Aufmerksamkeit gewidmet. Eine derart starke Zunahme des Forschungsinteresses steht in engem Zusammenhang mit der potentiellen Anwendung der OLEDs in kommerziellen Flachbildschirm-Anzeigeeinrichtungen. Mit den Vorteilen von niedrigen Kosten, geringem Gewicht, geringer Betriebsspannung, hoher Leuchtdichte, Robustheit, Farbabstimmbarkeit, Weitwinkelsicht, leichter Fertigung auf flexiblen Substraten sowie geringem Energieverbrauch werden OLEDs als außergewöhnlich attraktive Anwärter für Flachbildschirm-Anzeigetechnologien betrachtet.

[0004] Typischerweise enthält ein OLED mehrere Halbleiterschichten, die sandwichartig zwischen zwei Elektroden angeordnet sind. Die Kathode ist aus einer Metalllegierung mit geringer Austrittsarbeit gebildet, die durch Vakuumverdampfung abgeschieden wird, während die Anode als transparenter Leiter, wie Indiumzinnoxid (ITO, Indium Tin Oxide), ausgebildet ist. Bei Anlegen einer Gleichstromspannung (DC-Spannung) werden Löcher, die durch die ITO-Elektrode eingeführt sind, und Elektronen, die durch die Metallelektrode eingeführt sind, so rekombiniert, dass sich Excitonen bilden. Anschließende Relaxation der Excitonen führt zur Erzeugung von Elektrolumineszenz (EL).

[0005] Um eine höhere Leistungsfähigkeit der OLED zu erzielen, können mehrere organische Halbleiterschichten eingebracht werden, die die beiden Elektroden weiter voneinander trennen. Es gibt zwei Hauptkategorien von Materialien, die als diese Halbleiterschichten verwendet werden, nämlich durch Vakuumbedampfen aufgebrachte kleine Moleküle und durch Spinbeschichten aufgebrachte Polymermaterialien. Beide Fertigungsverfahren weisen ihre eigenen Vorteile auf. Vakuumbedampfen ermöglicht in der Regel eine bessere Beeinflussung der Schichtdicke und Gleichmäßigkeit, während Spinbeschichten in der Regel eine weniger komplexe Fertigung bei niedrigeren Produktionskosten bietet [Burrows, P. E.; Forrest, S. R.; Thompson, M. E. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 236 (1997)].

[0006] Trotz der Tatsache, dass Elektrolumineszenz von organischen Polymeren erstmals in den 1970er Jahren berichtet wurde [Kaneto, K.; Yoshino, K.; Koa, K.; Inuishi, Y. *Jpn. J. Appl. Phys.* 18, 1023 (1974)], haben Licht emittierende Polymere und OLEDs erst nach dem Bericht über gelbgrüne Elektrolumineszenz von Poly(p-phenylenvinyl) (PPV) vermehrte Beachtung erfahren [Burroughs, J. H.; Bradley, D. D. C.; Brown, A. R.; Marks, N.; Friend, R. H.; Burn, P. L.; Holmes, A. B. *Nature* 347, 539 (1990)]. Danach haben ähnliche Untersuchungen über PPV-Derivate als Licht emittierende Polymere berichtet [Braun, D.; Heeger, A. J. *Appl. Phys. Lett.* 58, 1982 (1991)]. Seither wurde eine Reihe von neuen elektrolumineszenten Polymeren auf verbesserte Eigenschaften untersucht.

[0007] Elektrolumineszenz von organischen Materialien wurde 1965 bei in flüssigen Elektrolyt eingelegten Anthracenkristallen entdeckt [Helfruch, W.; Schneider, W. G. *Phys. Rev. Lett.* 14, 229 (1965)]. Obwohl durch Verwendung eines Anthracendünnsfilms mit Feststoffelektroden niedrigere Betriebsspannungen erreicht werden können, wurde bei diesen einschichtigen Bauelementen eine sehr geringe Effizienz gefunden. Grüne Elektrolumineszenz in Hochleistung von einem kleinen organischen Molekül, Aluminium-tris-(8-hydroxychinolin) (Alq_3), wurde 1987 erstmals berichtet [Tang, C. W.; VanSlyke, S. A. *Appl. Phys. Lett.* 51, 913 (1987)]. Es wurde ein Doppelschicht-OLED von hoher Effizienz und mit niedriger Betriebsspannung beschrieben, bei dem Alq_3 sowohl als Emissionsschicht und Elektronentransportschicht eingesetzt ist. Anschließende Modifikation des

Bauelemente, so dass es eine Dreifachschichtstruktur aufweist, erreichte eine bessere Leistung mit höherer Effizienz.

[0008] Bei auf Phosphoreszenz basierenden OLEDs tritt eine höhere Leistungsfähigkeit auf, wenn die Halbleitmaterialien eine kurze Lebensdauer aufweisen. Eine kurze Lebensdauer kann durch Mischen von Singlett- und Triplett-Anregungszuständen und Nutzung einer Spin-Bahn(L-S)-Kopplung erreicht werden. In Gegenwart eines Schwermetallzentrums kann die Tendenz zur Spin-Bahn-Kopplung stark erhöht werden. Daher ist die Verwendung von Schwermetallkomplexen in OLEDs im Vergleich zur Verwendung von rein organischen Materialien in der Regel vorteilhaft. Der Anregungszustand mit niedrigster Energie einer metallorganischen Verbindung ist gemeinhin ein Metall-zu-Ligand-Charge-Transfer(MLCT)-Triplett-Zustand, der sich durch L-S-Kopplung mit dem angeregten Singlett-Zustand mischen kann, so dass höhere Photolumineszenzausbeuten erhalten werden [Baldo, M. A.; Thompson, M. E.; Forrest, S. R. *Pure Appl. Chem.* 71, 2095 (1999)]. Im Jahr 1998 haben Baldo et al. ein Phosphoreszenz-Elektrolumineszenz-Element mit hoher Quantenausbeute aufgezeigt, worin Platin(II)-2,3,7,8,12,13,17,18-octaethyl-21H,23H-porphin (PtOEP) als Farbstoff verwendet ist [Baldo, M. A.; O'Brien, D. F.; You, Y.; Shoustikov, A.; Sibley, S.; Thompson, M. E.; Forrest, S. R. *Nature* 395, 151 (1998); O'Brien, D. F.; Baldo, M. A.; Thompson, M. E.; Forrest, S. R. *Appl. Phys. Lett.* 74, 442 (1999)]. Ein mehrschichtiges Element, bei dem die Emissionsschicht Alq₃ mit PtOEP dotiert ist, zeigt eine starke Emission bei 650 nm, die den Triplett-Excitonen von PtOEP zugeschrieben wird.

[0009] Iridium(III)-cyclometallat ist eine weitere Klasse von Materialien, die für hoch effiziente OLEDs verwendet werden, die für eine intensive Phosphoreszenz bekannt sind. Baldo et al. haben die Verwendung von Iridium(III)-fac-tri(2-phenylpyridin) [Ir(ppy)₃] als Phosphoreszenz emittierendes Material und Dotierungsmittel in 4,4'-N,N'-Diarbazolbiphenyl (CBP) als Wirtsmolekül berichtet, wobei ein OLED mit hoher Quantenausbeute erhalten wurde [Baldo, M. A.; Lamansky, S.; Burrows, P. E.; Thompson, M. E.; Forrest, S. R. *Appl. Phys. Lett.* 75, 4 (1999)]. Im Lichte der guten Photolumineszenzeigenschaften bei Ir(ppy)₃ zeigte sich auch ein wachsendes Interesse am Einführen von 2-Phenylpyridinderivaten in ein Iridium(III)-Zentrum, um Triplett-Emitter für OLED-Anwendungen herzustellen. Ein weiteres Beispiel von Triplett-Emittieren ist der himmelblaue Komplex Iridium(III)-bis[2-(4',6'-difluorphenyl)pyridinato-N,C^{2'}]-picolat [Ir(4,6-dFppy)₂(pic)], der eine sehr hohe Photolumineszenz-Quantenausbeute von ungefähr 60% in Lösung und nahezu 100% in einem Feststofffilm zeigt, wenn er in einen Wirt mit hoher Triplett-Energie dotiert ist [Rausch, A. F.; Thompson, M. E.; Yersin, H. *Inorg. Chem.* 48, 1928 (2009); Adachi, C.; Kwong, R. C.; Djurovich, P. I.; Adamovich, V.; Baldo, M. A.; Thompson, M. E.; Forrest, S. R. *Appl. Phys. Lett.* 79, 2082 (2001); Kawamura, Y.; Goushi, K.; Brooks, J.; Brown, J. J.; Sasabe, H.; Adachi, C. *Appl. Phys. Lett.* 86, 071104 (2005)]. Trotz der intensiven Nutzung von 2-Phenylpyridin und seiner Derivate in Iridium(III)-Systemen zur Herstellung von OLEDs, bleibt die Verwendung von Leuchtstoffen, die alternative Metallzentren mit diesen Liganden enthalten, im Wesentlichen unerforscht und bleibt unterentwickelt.

[0010] Außer einer Erhöhung der Emissionsausbeuten ist die Möglichkeit die Emissionsfarbe zu verändern wünschenswert. Die meisten Ansätze zur Farbvarianz betreffen die Verwendung von unterschiedlichen Emissionscharakteristiken zur Farbabstimmung. Beispiele, die ein einziges Lichtemissionsmaterial als Dotierungsmittel einsetzen, um mehr als eine Emissionsfarbe zu erzeugen, sind selten. Jüngste Untersuchungen haben gezeigt, dass unterschiedliche Emissionsfarben von einem einzelnen Emissionsdotierungsmittel unter Verwendung eines Phosphoreszenzmaterials erzeugt werden können, indem die Vorspannungsrichtung verändert wird oder indem die Konzentration an Dotierungsmittel verändert wird. Welter et al. berichten die Herstellung eines einfachen OLED, das aus Polymer PPV mit Halbleitereigenschaften und phosphoreszentem Rutheniumpolypyridin als Dotierungsmittel gebildet ist [Welter, S.; Krüner, K.; Hofstraal, J. W.; De Cola, D. *Nature*, 421, 54 (2003)]. Bei Vorwärtsspannung wird eine rote Emission aus dem Anregungszustand des phosphoreszenten Rutheniumpolypyridin als Dotierungsmittel beobachtet, während bei Rückwärtsspannung das OLED eine grüne Emission emittiert, wobei der niedrigste angeregte Singlett-Zustand von PPV besetzt ist. Adamovich et al. berichten die Verwendung einer Reihe von phosphoreszenten Platin(II)-[2-(4,6-difluorphenyl)pyridinato-N,C^{2'}]-diketonen als einzelnes emittierendes Dotierungsmittel in OLED [Adamovich, V.; Brooks, J.; Tamayo, A.; Alexander, A. M.; Djurovich, P. R.; D'Andrade, B. W.; Adachi, C.; Forrest, S. R.; Thompson, M. E. *New J. Chem.* 26, 1171 (2002)]. Sowohl blaue Emission von Monomerverbindungen und orange Emission aus den Aggregaten werden in solchen OLED beobachtet, bei denen die relative Intensität der orangefarbenen Emission zunimmt, wenn der Dotierungsgrad zunimmt. Als Folge davon kann die Elektrolumineszenzfarbe dadurch abgestimmt werden, dass die Dotierungsmittelkonzentration mit gleichen Intensitäten zu den Monomer- und Aggregatbändern verändert wird. In beiden Fällen kann die Veränderung der Elektrolumineszenzfarbe in einem OLED dadurch erreicht werden, dass die externe Stimulation oder die Herstellungsbedingungen verändert werden, während das gleiche Licht emittierende Material eingesetzt ist.

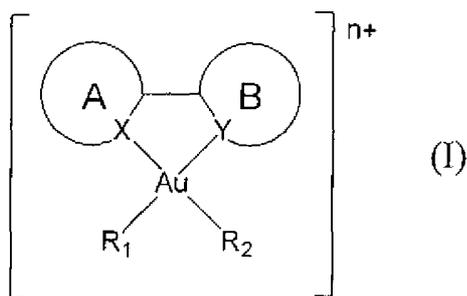
[0011] Obwohl ein steigendes Interesse an Elektrophosphoreszenzmaterialien besteht, insbesondere an Metallkomplexen mit Schwermetallzentren, waren die meisten Anstrengungen auf die Verwendung von Iridium(III), Platin(II) und Ruthenium(II) gerichtet. Anderen Metallzentren wurde sehr wenig Beachtung geschenkt. Im Gegensatz zu isoelektronischen Platin(II)-Verbindungen, von denen bekannt ist, dass sie gute Lumineszenzeigenschaften zeigen, wurde von sehr wenigen Beispielen von lumineszierenden Gold(III)-Komplexen beachtet, was möglicherweise am Vorliegen von energiearmen d-d-Ligandenfeld(LF)-Zuständen und der beim Gold(III)-Metallzentrum beobachteten Elektrophilie liegt. Eine Möglichkeit, die Lumineszenz von Gold(III)-Komplexen zu verbessern, ist das Einführen von starken σ -Donatorliganden, wie es zuerst von Yam et al. für stabile Gold(III)-Arylverbindungen aufgezeigt wurde, bei denen interessante Photolumineszenzeigenschaften schon bei Raumtemperatur gefunden wurden [Yam, V. W. W.; Choi, S. W. K.; Lai, T. F.; Lee, W. K. J. Chem. Soc., Dalton Trans. 1001 (1993)]. Ein weiterer interessanter Donorligand ist die Alkynylgruppe. Obwohl die Lumineszenzeigenschaften von Gold(I)-alkynylen ausführlich untersucht wurden, blieb die Chemie von Gold(III)-alkynylen im Wesentlichen unbeachtet, mit Ausnahme eines kurzen Berichts zur Synthese einer Gold(III)-alkynylverbindung von 6-Benzyl-2,2'-bipyridin [Cinellu, M. A.; Minghetti, G.; Pinna, M. V.; Stoccoro, S.; Zucca, A.; Manassero, M. J. Chem. Soc. Dalton Trans. 2823 (1999)], aber ihr Lumineszenzverhalten blieb unerforscht. Yam et al. beschreiben die Synthese einer Reihe von Gold(III)-bis-cyclometallat-alkynylverbindungen unter Verwendung verschiedener starker σ -Donatoralkynylliganden, wobei alle Verbindungen gutes Lumineszenzverhalten sowohl bei Raumtemperatur und bei niedrigen Temperaturen in verschiedenen Medien zeigen [Yam, V. W.-W.; Wong, K. M.-C.; Hung, L.-L.; Zhu, N. Angew. Chem. Int. Ed. 44, 3107 (2005); Wong, K. M.-C.; Zhu, K.; Hung, L.-L.; Zhu, N.; Yam, V. W.-W.; Kwok, H. S. Chem. Commun. 2906 (2005); Wong, K. M.-C.; Hung, L.-L.; Lam, W. H.; Zhu, N.; Yam, V. W.-W. J. Am. Chem. Soc. 129, 4350 (2007)]. Außerdem ergibt die Verwendung dieser lumineszierenden Gold(III)-Verbindungen als phosphoreszierendes Dotierungsmaterial in OLEDs eine starke Elektrolumineszenz mit hoher externer Quantenausbeute von ungefähr 5,5%. Diese Lumineszenz-Gold(III)-Verbindungen enthalten einen tridentaten Liganden und mindestens eine starke σ -Donatorgruppe, die mit einem Gold(III)-Metallzentrum koordiniert ist.

KURZE ZUSAMMENFASSUNG DER ERFINDUNG

[0012] Ausführungsformen der Erfindung sind auf neue lumineszierende Gold(III)-Verbindungen gerichtet. Weitere Ausführungsformen der Erfindung sind auf ein Verfahren zur Herstellung der neuen lumineszierenden Gold(III)-Verbindungen gerichtet. Weitere Ausführungsformen der Erfindung sind auf Leuchtelemente aus den neuen lumineszierenden Gold(III)-Verbindungen gerichtet.

[0013] Die neuen lumineszierenden Gold(III)-Verbindungen sind Koordinationsverbindungen, die einen bidentaten Liganden und mindestens eine starke σ -Donatorgruppe enthalten, die mit einem Gold(III)-Metallzentrum koordiniert sind.

[0014] Die neuen lumineszierenden Gold(III)-Verbindungen weisen die chemische Struktur auf:



worin:

X ein Stickstoffatom ist,

Y ausgewählt ist aus einem Kohlenstoff- oder einem Stickstoffatom,

A-B ein substituierter oder unsubstituierter Cyclometallatligand (für Y=C) oder Diiminligand (für Y=N) ist,

A und B cyclische Strukturderivate sind,

R₁ und R₂ optional substituierte Kohlenstoffdonorliganden sind, wobei R₁ und R₂ nicht -CH₃, -CH₂SiMe₃, Mesityl, Pentafluorphenyl, -CH₂C(O)CH₃, -CH(COPh)SO₂(COPh)CH-, -CH(CN)SO₂(CN)CH-, -C₆H₄N=NC₆H₅ sind, und wobei R₁ und R₂ entweder miteinander verknüpft oder voneinander getrennt sein können,

n gleich Null oder eine ganze Zahl von 1 bis 3 ist.

[0015] Die lumineszierenden Gold(III)-Verbindungen gemäß Ausführungsformen der Erfindung zeigen starke Photolumineszenz über einen Triplett-Anregungszustand nach Photoanregung oder Elektrolumineszenz über Triplett-Anregung nach Anlegen einer Gleichstrom(DC)-Spannung. Viele Verbindungen gemäß Ausführungsformen der Erfindung sind thermisch stabil und ausreichend flüchtig, so dass sie bei Sublimation oder Vakuum-aufdampfen eine Dünnschicht bilden können. Alternativ können die Verbindungen für eine Dünnschichtabscheidung durch Spinbeschichten oder Tintenstrahldrucken oder andere bekannte Herstellungsmethoden in eine Wirtsmatrix dotiert werden. Die Verbindungen können zur Herstellung von OLEDs als Phosphoreszenz-Emitter oder Dotierungsmittel zum Erzeugen von Elektrolumineszenz verwendet werden.

[0016] In einem OLED gemäß einer Ausführungsform der vorliegenden Erfindung ist die lumineszente Gold(III)-Verbindung in einer Lichtemissionsschicht eingebracht. Die Struktur des OLED, das die lumineszierenden Gold(III)-Verbindungen der vorliegenden Erfindung umfasst, kann eine Schichtstruktur mit einer Kathodenschicht, einer Elektronentransportschicht, der lumineszierenden Gold(III)-Verbindung als Lichtemissionsschicht, eine Trägersperrschicht, eine Löchertransportschicht und eine Anode umfassen.

KURZE BESCHREIBUNG DER ZEICHNUNGEN

[0017] Fig. 1 ist eine schematische Darstellung eines organischen EL-Elements gemäß einer Ausführungsform der Erfindung.

[0018] Fig. 2 zeigt UV-vis-Absorptionsspektren von Verbindung 1 und 2 in Dichlormethan bei 298 K.

[0019] Fig. 3 zeigt Emissionsspektren von Verbindung 1 und 2 in Dichlormethan bei 298 K, wobei keine Instrumentenkorrektur bei der Emissionswellenlänge angewendet wurde.

[0020] Fig. 4 zeigt Emissionsspektren im Festzustand von Dünnschichten aus undotiertem PVK:Butyl-PBD und mit Verbindung 2 dotiertem PVK:Butyl-PBD.

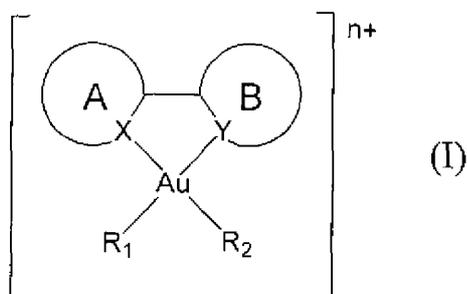
[0021] Fig. 5 zeigt EL-Spektren für Elemente aus Beispiel 4, wobei die Spektrallinien bei zunehmender Konzentration an Verbindung 1 (2% bis 10%) eine abnehmende Absorption bei 484 und 518 nm zeigen.

AUSFÜHRLICHE BESCHREIBUNG DER ERFINDUNG

[0022] Ausführungsformen der Erfindung sind auf eine neue Klasse von lumineszierenden Gold(III)-Verbindungen mit einem bidentaten Liganden und mindestens einer starken σ -Donatorgruppe gerichtet. Weitere Ausführungsformen der Erfindung sind auf die Synthese dieser lumineszierenden Gold(III)-Verbindungen gerichtet. Die neuen Verbindungen umfassen:

mindestens ein Goldmetallzentrum mit einem Oxidationszustand von $+3$ und vier Koordinationsstellen, einen bidentaten Liganden mit einem oder zwei aromatischen oder heterocyclischen Ring(en), die mit zwei Koordinationsstellen des Goldmetallzentrums koordiniert sind, und zwei monodentate Liganden oder einen zweiten bidentaten Liganden, die mit zwei Koordinationsstellen des Goldmetallzentrums koordiniert sind, wobei mindestens ein Ligand ein starker σ -Donatorligand ist und wobei die Verbindung neutral oder positiv geladen ist.

[0023] Die Verbindungen weisen die in der allgemeinen Formel (I) gezeigte chemische Struktur auf:



worin:

- (a) X ein Stickstoffatom ist,
 (b) Y ausgewählt ist aus einem Kohlenstoff- oder einem Stickstoffatom,
 (c) A-B ein substituierter oder unsubstituierter Cyclometallatligand (für Y=C) oder Diiminligand (für Y=N) ist,
 (d) A und B cyclische Strukturderivate sind,
 (e) R₁ und R₂ am Goldatom angelagerte optional substituierte Kohlenstoffdonorliganden sind, mit der Voraussetzung, dass R₁ und R₂ nicht -CH₃, -CH₂SiMe₃, Mesityl, Pentafluorphenyl, -CH₂C(O)CH₃, -CH(COPh)SO₂(COPh)CH-, -CH(CN)SO₂(CN)CH-, -C₆H₄N=NC₆H₅ sind, und wobei R₁ und R₂ entweder miteinander verknüpft oder voneinander getrennt sein können.
 (f) n gleich Null oder eine ganze Zahl von 1 bis 3, bevorzugt 1 ist.

[0024] Die Ringe A und B sind cyclische Strukturderivate, wobei die cyclischen Strukturen unabhängig ausgewählt sind aus einem 5- oder 6-gliedrigen Aromaten, Heteroaromaten oder Heterocyclen, wie sie im Fachbereich bekannt sind. Wenn Ring A ein Heteroaromat oder Heterocyclen ist, kann Ring A ein Stickstoff enthaltender 5- oder 6-gliedriger Heteroaromat oder Heterocyclen sein. Der Aromat oder Heteroaromat kann Benzol, Pyridin, Thiophen, Furan, Pyrazol, Imidazol, Oxazol, Isoxazol, Thiazol, Isothiazol, Isochinolin, Pyrrol, Pyrazin, Pyridazin, Pyrimidin, Benzimidazol, Benzofuran, Benzothiazol, Indol, Naphthalen, Anthracen, Pyren, Triazol, Tetrazol, Pyran, Thiapyran, Oxadiazol, Triazin, Tetrazin, Carbazol, Dibenzothiophen, Dibenzofuran, Fluoren oder Derivate davon sein.

[0025] Die Ringe A und B können unsubstituiert sein oder können substituiert sein mit einer oder mehreren Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkylaryl-, Cycloalkyl-, OR-, NR₂-, SR-, C(O)R-, C(O)OR-, C(O)NR₂-, ON-, CF₃-, NO₂-, SO₂-, SOR-, SO₃R-, Halogen-, Aryl-, substituierten Aryl-, Heteroaryl-, substituierten Heteroaryl- oder Heterocyclengruppen, und zusätzlich oder alternativ können zwei beliebige benachbarte substituierte Positionen der Ringe A und B zusammen, unabhängig, eine fusionierte 5- oder 6-gliedrige cyclische Gruppe bilden, wobei die cyclische Gruppe Cycloalkyl, Cycloheteroalkyl, Aryl oder Heteroaryl ist, und wobei die fusionierte 5- oder 6-gliedrige cyclische Gruppe mit einem oder mehreren aus Alkyl, Alkenyl, Alkynyl, Alkylaryl, Cycloalkyl, CN, CF₃, C(O)OR, C(O)R, NR₂, NO₂, OR oder Halogen substituiert sein kann und jedes R unabhängig ein Alkyl, Alkenyl, Alkynyl, Alkylaryl, Aryl und Cycloalkyl ist.

[0026] Der Cyclometallatligand, A-B (für Y=C), oder der Diiminligand, A-B (für Y=N), sind aus den im Fachbereich bekannten ausgewählt. Zum Beispiel können die Cyclometallatliganden, ohne darauf beschränkt zu sein, 2-Phenylpyridine, Phenylisochinoline, Phenylpyrazole, 7,8-Benzochinoline und Derivate davon umfassen und Diiminliganden können, ohne darauf beschränkt zu sein, 2,2'-Bipyridine, 1,10-Phenanthroline und Derivate davon umfassen. Die Cyclometallat- und Diiminliganden können unsubstituiert sein oder können substituiert sein mit einer oder mehreren Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkylaryl-, Cycloalkyl-, OR-, NR₂-, SR-, C(O)R-, C(O)OR-, C(O)NR₂-, CN-, CF₃-, NO₂-, SO₂-, SOR-, SO₃R-, Halogen-, Aryl-, substituierten Aryl-, Heteroaryl-, substituierten Heteroaryl- oder Heterocyclengruppen, und zusätzlich oder alternativ können ein oder mehrere Paare von benachbarten substituierten Positionen, die kein Atom enthalten, das an das Gold(III) bindet, in Kombination, unabhängig, eine fusionierte 5- oder 6-gliedrige cyclische Gruppe bilden, wobei die cyclische Gruppe Cycloalkyl, Cycloheteroalkyl, Aryl oder Heteroaryl ist, und wobei optional die fusionierte 5- oder 6-gliedrige cyclische Gruppe mit einem oder mehreren aus Alkyl, Alkenyl, Alkynyl, Alkylaryl, Cycloalkyl, OR, C(O)R, C(O)OR, O(O)NR₂, ON, CF₃, NR₂, NO₂, SR, SO₂, SOR, SO₃R und Halogen substituiert sein kann, wobei R unabhängig Alkyl, Alkenyl, Alkynyl, Alkylaryl, Aryl und Cycloalkyl ist.

[0027] R₁ und R₂ können gleich oder unterschiedlich sein. Bevorzugt sind R₁ und R₂ unabhängig substituiertes oder unsubstituiertes Alkynyl oder substituiertes oder unsubstituiertes Arylalkynyl. Besonders bevorzugt sind R₁ und R₂ unabhängig unsubstituiertes Alkynyl oder Alkynyl substituiert mit R oder Si(R)₃, worin R wie oben definiert ist. Oder alternativ sind R₁ und R₂ unabhängig unsubstituiertes oder substituiertes Arylalkynyl, bevorzugt unsubstituiertes oder substituiertes Phenylalkynyl.

[0028] Der Ausdruck "Halo" oder "Halogen" bedeutet ein Fluor, Chlor, Brom und Iod.

[0029] Der Ausdruck "Alkyl" bedeutet entweder eine geradkettige oder verzweigt-kettige Alkylgruppe. Die Alkylgruppen enthalten von eins bis achtzehn oder mehr Kohlenstoffatome, bevorzugt 1 bis 12, besonders bevorzugt 1 bis 8 und insbesondere bevorzugt 1 bis 4 Kohlenstoffatome, darunter Methyl, Ethyl, Propyl, Isopropyl, Butyl, Isobutyl, tert-Butyl und dergleichen. Außerdem kann die Alkylgruppe unsubstituiert sein oder substituiert sein mit einem oder mehreren Substituenten darunter, ohne darauf beschränkt zu sein, OR, NR₂, SR, C(O)R, C(O)OR, C(O)NR₂, CN, CF₃, NO₂, SO₂, SOR, SO₃R, Halogen und cyclisches Amin, wobei R wie oben definiert ist.

[0030] Der hier verwendete Ausdruck "Alkenyl" umfasst sowohl geradkettige wie verzweigt-kettige Alkenradikale mit zwei bis achtzehn oder mehr Kohlenstoffatomen, bevorzugt 2 bis 12, besonders bevorzugt 2 bis 8 und insbesondere bevorzugt 2 bis 4 Kohlenstoffatomen. Die Alkenylgruppe kann unsubstituiert sein oder substituiert sein mit einem oder mehreren Substituenten darunter, ohne darauf beschränkt zu sein, OR, NR₂, SR, C(O)R, C(O)OR, O(O)NR₂, CN, CF₃, NO₂, SO₂, SOR, SO₃R, Halogen und cyclisches Amin, wobei R wie oben definiert ist.

[0031] Der hier verwendete Ausdruck "Alkyl" umfasst sowohl geradkettige wie verzweigt-kettige Alkinradikale mit zwei bis achtzehn oder mehr Kohlenstoffatomen, bevorzugt 2 bis 12, besonders bevorzugt 2 bis 8 und insbesondere bevorzugt 2 bis 4 Kohlenstoffatomen. Die Alkylgruppe kann unsubstituiert sein oder substituiert sein mit einem oder mehreren Substituenten darunter, ohne darauf beschränkt zu sein, OR, NR₂, SR, C(O)R, C(O)OR, C(O)NR₂, CN, CF₃, NO₂, SO₂, SOR, SO₃R, Si(R)₃, Halogen und cyclisches Amin, wobei R wie oben definiert ist.

[0032] Der hier verwendete Ausdruck "Arylalkyl" umfasst eine Alkylgruppe, die eine aromatische Gruppe als Substituenten trägt. Die Arylalkylgruppe kann unsubstituiert sein oder substituiert sein mit einem oder mehreren Substituenten darunter, ohne darauf beschränkt zu sein, R, halogensubstituiertes R, bevorzugt CF₃, OR, NH₂, NHR, NR₂, SR, C(O)R, C(O)OR, O(O)NR₂, CN, NO₂, SO₂, SOR, SO₃R, Halogen und cyclisches Amin, wobei R wie oben definiert ist.

[0033] Der hier verwendete Ausdruck "Alkylaryl" umfasst eine Arylgruppe, die eine Alkylgruppe als Substituenten trägt. Die Alkylarylgruppe kann unsubstituiert sein oder substituiert sein mit einem oder mehreren Substituenten darunter, ohne darauf beschränkt zu sein, OR, NR₂, SR, C(O)R, C(O)OR, O(O)NR₂, CN, CF₃, NO₂, SO₂, SOR, SO₃R, Halogen und cyclisches Amin, wobei R wie oben definiert ist.

[0034] Der hier verwendete Ausdruck "Cycloalkyl" umfasst cyclische Alkylgruppen. Cycloalkylgruppen können 3 bis 7 oder mehr Kohlenstoffatome enthalten und Cyclopropyl, Cyclopentyl, Cyclohexyl und dergleichen umfassen. Cycloalkylgruppen können unsubstituiert sein oder substituiert sein mit einem oder mehreren Substituenten darunter, ohne darauf beschränkt zu sein, OR, NR₂, SR, C(O)R, C(O)OR, O(O)NR₂, CN, CF₃, NO₂, SO₂, SOR, SO₃R, Halogen und cyclisches Amin, wobei R wie oben definiert ist.

[0035] Der hier verwendete Ausdruck "Alkoxy" umfasst lineare oder verzweigte Alkoxygruppen mit einem bis achtzehn oder mehr Kohlenstoffatomen, bevorzugt 1 bis 12, besonders bevorzugt 1 bis 8 und insbesondere bevorzugt 1 bis 4 Kohlenstoffatomen und kann unsubstituiert sein oder substituiert sein mit einem oder mehreren Substituenten darunter, ohne darauf beschränkt zu sein, OR, NR₂, SR, C(O)R, C(O)OR, C(O)NR₂, CN, CF₃, NO₂, SO₂, SOR, SO₃R, Halogen und cyclisches Amin, wobei R wie oben definiert ist.

[0036] Aryl allein oder in Kombination umfasst carbocyclische Aromatensysteme, die ein, zwei oder drei Ringe enthalten, wobei jeder Ring frei angelagert sein kann oder fusioniert sein kann und 5- oder 6-gliedrige Ringe sein können. Das Aryl ist bevorzugt Phenyl. Die Arylringe können unsubstituiert sein oder substituiert sein mit einem oder mehreren Substituenten darunter, ohne darauf beschränkt zu sein, OR, NR₂, SR, C(O)R, C(O)OR, O(O)NR₂, CN, CF₃, NO₂, SO₂, SOR, SO₃R, Halogen und cyclisches Amin, wobei R wie oben definiert ist.

[0037] Heteroaryl allein oder in Kombination umfasst heterocyclische Aromatensysteme, die ein, zwei, drei oder mehr Ringe enthalten, wobei jeder Ring frei oder fusioniert kombiniert sein kann, wobei jeder Ring des Systems ein 5- oder 6-gliedriger Ring ist. Das Heteroatom kann S, O, N oder P sein.

[0038] Heterocyclisch und Heterocyclus bezeichnen einen 3- bis 7-gliedrigen Ring, der mindestens ein Heteroatom enthält. Die heterocyclischen Ringe können aromatisch sein, darunter, ohne darauf beschränkt zu sein, Pyridin, Thiophen, Furan, Pyrazol, Imidazol, Oxazol, Isoxazol, Thiazol, Isothiazol, Isochinolin, Pyrrol, Pyrazin, Pyridazin, Pyrimidin, Benzimidazol, Benzofuran, Benzothiazol, Indol, Naphthalen, Triazol, Tetrazol, Pyran, Thiapyran, Oxadiazol, Triazin, Tetrazin, Carbazol, Dibenzothiophen, Dibenzofuran, Indol und Fluorin. Die heterocyclischen Ringe können nicht-aromatisch sein, darunter, ohne darauf beschränkt zu sein, Piperazin, Piperidin und Pyrrolidin. Die heterocyclischen Ringe können unsubstituiert sein oder substituiert sein und können, ohne darauf beschränkt zu sein, Alkyl, Alkoxy und Aryl umfassen. Das Heteroatom kann S, O, N oder P sein.

[0039] Cyclometallatligand ist ein im Fachbereich bekannter Ausdruck und umfasst, ohne darauf beschränkt zu sein, 2-Phenylpyridin (ppy), 2-(p-Tolyl)pyridin (ptpy), 4-(2-Pyridyl)benzaldehyd (pba), 2-(2,4-Difluorphenyl)pyridin (fppy), 4-Pyridin-2-ylbenzoesäure, 3-Pyridin-2-ylbenzoesäure, 2-Methyl-6-phenylpyridin, 3-Methyl-2-phenylpyridin, 4-Methyl-2-phenylpyridin, 5-Methyl-2-phenylpyridin, 2-Phenylpyridin-3-carbonsäure, 2-Phenyl-

pyridin-4-carbonsäure, 6-Phenylpyridin-3-carbonsäure, 2,3-Diphenylpyridin, 2,4-Diphenylpyridin, 2,5-Diphenylpyridin, Phenylpyrazol (ppz), 3-Methyl-1-phenyl-1H-pyrazol (mppz), 7,8-Benzochinolin (bzq), 2-Phenylchinolin (pq), 1-Phenylisochinolin (piq), 2-Phenylchinolin, 3-Phenylisochinolin, 3,4-Diphenylisochinolin und 2-(Benzimidazol-2-yl)chinolin (biq).

[0040] Diiminligand ist ein im Fachbereich bekannter Ausdruck und umfasst, ohne darauf beschränkt zu sein, 2,2'-Bipyridin (bpy), 4-Chlor-2,2'-bipyridin (4-Cl-bpy), 4-Methyl-2,2'-bipyridin (4-Me-bpy), 4-Carboxy-2,2'-bipyridin, 4,4'-Dimethyl-2,2'-bipyridin (4,4'-Me₂-bpy), 4,4'-Diethyl-2,2'-bipyridin (4,4'-Et₂-bpy), 4,4'-Di-tert-butyl-2,2'-bipyridin (4,4'-tBu₂-bpy), 4,4'-Diphenyl-2,2'-bipyridin (4,4'-Ph₂-bpy), 4,4'-Dihexyl-2,2'-bipyridin, 4,4'-Dioctyl-2,2'-bipyridin, 4,4'-Dicarboxy-2,2'-bipyridin, 4,4'-bis(Methoxycarbonyl)-2,2'-bipyridin, 4,4'-bis(Ethoxycarbonyl)-2,2'-bipyridin, 5,5'-bis(Ethoxycarbonyl)-2,2'-bipyridin, 5,5'-Dicarboxy-2,2'-bipyridin, 5-Carboxy-2,2'-bipyridin, 5-Methyl-2,2'-bipyridin, 6-Brom-2,2'-bipyridin, 5-Chlor-2,2'-bipyridin, 1,10-Phenanthrolin (phen), 4-Chlor-1,10-phenanthrolin (4-Cl-phen), 4-Methyl-1,10-phenanthrolin (4-Me-phen), 5-Chlor-1,10-phenanthrolin (5-Cl-phen), 5-Brom-1,10-phenanthrolin (5-Br-phen), 5-Phenyl-1,10-phenanthrolin (5-Ph-phen), 5-Nitro-1,10-phenanthrolin (5-NO₂-phen), 5-Amino-1,10-phenanthrolin (5-NH₂-phen), 5-Methyl-1,10-phenanthrolin (5-Me₂-phen), 4,7-Dimethyl-1,10-phenanthrolin (4,7-Me₂-phen), 4,7-Diphenyl-1,10-phenanthrolin (4,7-Ph₂-phen), 4,7-bis(4-Bromphenyl)-1,10-phenanthrolin, 4,7-bis(Biphenyl)-1,10-phenanthrolin, 5,6-Dimethyl-1,10-phenanthrolin (5,6-Ph₂-phen), 3,4,7,8-Tetramethyl-1,10-phenanthrolin (3,4,7,8-Me₄-phen), 3-Brom-1,10-phenanthrolin (3-Br-phen), 3,8-Dibrom-1,10-phenanthrolin (3,8-Br₂-phen), 5,6-Dibrom-1,10-phenanthrolin (5,6-Br₂-phen), 2,9-Dichlor-1,10-phenanthrolin (2,9-Cl₂-phen), 2,9-Dimethyl-1,10-phenanthrolin (2,9-Me₂-phen), 2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthrolin (2,9-Me₂-4,7-Ph₂-phen), 5-Carboxy-1,10-phenanthrolin, 5-Isothiocyanato-1,10-phenanthrolin, Dipyrido[3,2-a:2',3'-c]phenazin (dppz) und Benzo[*l*]dipyrido[3,2-a:2',3'-c]phenazin (dppn), 2-(2-Thienyl)pyridin und 3-(2-thienyl)pyridin.

[0041] Benzol beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Benzol. Pyridin beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Pyridin. Thiophen beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Thiophen. Furan beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Furan. Pyrazol beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Pyrazol. Imidazol beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Imidazol. Oxazol beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Oxazol. Isoxazol beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Isoxazol. Thiazol beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Thiazol. Isothiazol beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Isothiazol. Isochinolin beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Isochinolin. Pyrrol beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Pyrrol. Pyrazin beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Pyrazin. Pyridazin beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Pyridazin. Pyrimidin beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Pyrimidin. Benzimidazol beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Benzimidazol. Benzofuran beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Benzofuran. Benzothiazol beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Benzothiazol. Indol beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Indol. Naphthalen beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Naphthalen. Anthracen beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Anthracen. Pyren beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Pyren. Triazol beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Triazol. Tetrazol beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Tetrazol. Pyran beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Pyran. Thiapyran beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Thiapyran. Oxadiazol beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Oxadiazol. Triazin beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Triazin. Tetrazin beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Tetrazin. Carbazol beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Carbazol. Dibenzothiophen beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Dibenzothiophen. Dibenzofuran beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Dibenzofuran. Fluoren beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Fluoren. Piperazin beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Piperazin. Piperidin beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Piperidin. Pyrrolidin beinhaltet substituiertes oder unsubstituiertes Pyrrolidin.

[0042] Die vorliegende Erfindung wird durch die folgenden nicht einschränkenden Beispiele erläutert. Es versteht sich, dass hierbei Änderungen und Variationen vorgenommen werden können, ohne den Rahmen und den Geist der Erfindung zu verlassen, wie sie nachfolgend beansprucht wird. Es versteht sich ebenso, dass verschiedene Theorien, weshalb die Erfindung funktioniert, nicht als Einschränkung zu verstehen sind. Die hier beschriebenen Verbindungen sind durchgehend in ihrer monomeren Struktur dargestellt. Wie den Fachleuten bekannt ist, können die Verbindungen ebenso als Dimere, Trimere, größere Oligomere oder Dendrimere vorliegen.

[0043] In anderen Ausführungsformen der Erfindung werden die lumineszierenden Gold(III)-Verbindungen der Struktur (I) in hoher Reinheit hergestellt. Das Syntheseverfahren umfasst Bereitstellen eines Gold(III)-dichlorids oder eines Äquivalents, das mit einem Cyclometallatliganden oder einem Diiminliganden komplexiert wird, zum Beispiel einem 2-Phenylpyridin bzw. 2,2'-Bipyridin. Die komplexierten Gold(III)-dichloride können nach einem beliebigen Verfahren hergestellt werden, das den Fachleuten bekannt ist, zum Beispiel den Verfahren,

die bei Constable et al., J. Organomet. Chem, 363, 419 (1989) und Cinellu et al., J. Chem. Soc., Dalton Trans. 1261 (2000) offenbart sind, die hiermit durch Bezugnahme zum Inhalt dieser Beschreibung gemacht werden. Der Gold(III)-Komplex wird danach mit einer starken σ -Donatorligandenvorstufe umgesetzt, zum Beispiel einem alkalischen Metallalkinyl, Metallarylalkinyl, substituiertem Metallalkinyl oder substituiertem Metallarylalkinyl, was Ersetzen mindestens eines der Chloride des komplexierten Gold(III)-dichlorids beinhaltet, so dass die neuen lumineszierenden Gold(III)-Verbindungen der Struktur (I) gebildet werden, wie es aus einer Betrachtung der unten angegebenen Reaktionsgleichungen 1–4 ersichtlich ist, wobei das Metall das Alkalimetall Lithium ist. Obwohl das Verfahren in Abhängigkeit vom gewünschten σ -Donatorliganden variabel ist, werden die Reaktionen in der Regel in Lösung ausgeführt. Die Reaktionen werden in der Regel unterhalb normaler Raumtemperaturen durchgeführt, und können bei sehr niedrigen Temperaturen, zum Beispiel -78°C , der Temperatur eines Trockeneis-Aceton-Bades, durchgeführt werden. Spezielle Bedingungen bei Lösungsmittel und Temperatur sind in Abhängigkeit von der Struktur der gewünschten Gold(III)-Verbindung variabel, wie für die Fachleute ersichtlich ist. Eine Reinigung kann nach einem beliebigen Verfahren oder einer Kombination von Verfahren durchgeführt werden, darunter Chromatographie, Extraktion, Kristallisation, Sublimation oder eine beliebige Kombination davon.

[0044] Die lumineszierenden Gold(III)-Verbindungen können eingesetzt werden, um ein organisches Leuchtelement (OLED) gemäß den Ausführungsformen der Erfindung zu bilden. Das organische Leuchtelement der vorliegenden Erfindung kann ein Elektrodenpaar und eine Emissionsschicht zwischen den Elektroden umfassen. Das organische Leuchtelement kann weiter eine Löchertransportschicht zwischen der Emissionsschicht und der Anode umfassen. Das organische Leuchtelement kann weiter eine Elektronentransportschicht zwischen der Emissionsschicht und der Kathode umfassen. Es kann weiter eine Trägersperrschicht zwischen der Emissionsschicht und der Löchertransportschicht vorgesehen sein. Wie in [Fig. 1](#) gezeigt ist, umfasst das organische Leuchtelement in einer Ausführungsform der vorliegenden Erfindung: ein Glassubstrat, eine Anode, eine Löchertransportschicht, eine Trägersperrschicht, eine Emissionsschicht, eine Elektronentransportschicht und eine Kathode. Die lumineszierenden Gold(III)-Verbindungen sind in der Emissionsschicht enthalten.

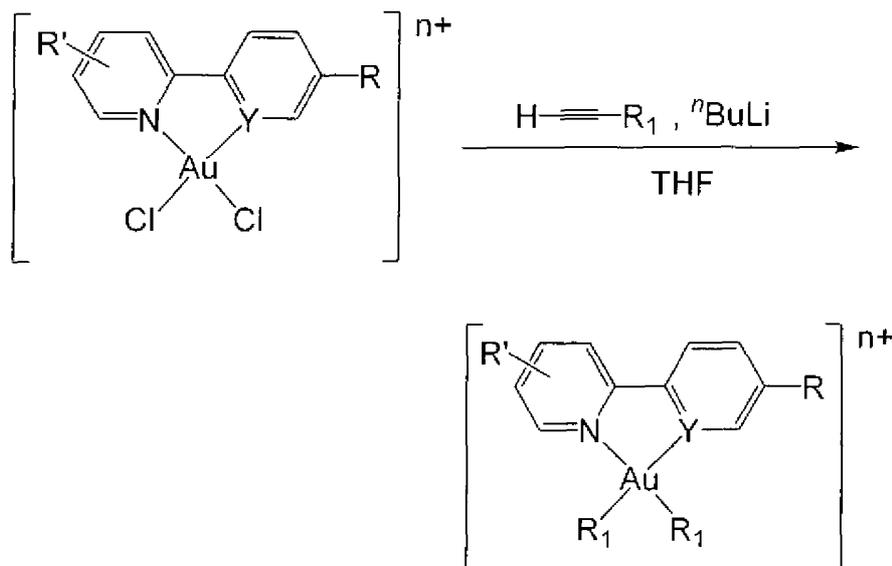
[0045] Leuchtelemente können in Displays (Anzeigeeinrichtungen) oder Festkörper-Beleuchtungen (SSL, Solid-State Lighting) verwendet werden, und können als solche verwendet werden, die durch Photolumineszenz- oder Elektrolumineszenzprozesse funktionieren. Die neuen Gold(III)-Verbindungen können das primäre Lumineszenzmaterial oder ein sekundäres Lumineszenzmaterial in der Einrichtung sein. Die neuen Gold(III)-Verbindungen können als elektrophosphoreszierende Dotierungsmittel in einem mehrschichtigen OLED mit einer Quantenausbeute von bis zu 5,5% oder mehr eingesetzt werden. Mit Vorteil können die neuen Gold(III)-Verbindungen auf den OLEDs durch Vakuumabscheidungs- oder Flüssigabscheidungstechniken aufgebracht werden.

BEISPIEL 1

Synthese und Charakterisierung

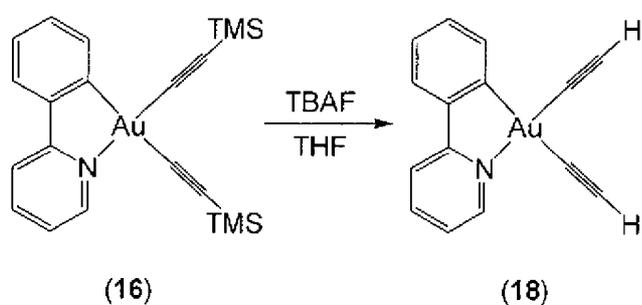
[0046] Die Verbindungen 1–17 wurden nach der folgenden Verfahrensweise hergestellt, wie es unten in der Reaktionsgleichung 1 angegeben ist. Die Verbindungen 18 und 19 wurden unter Verwendung der in den Reaktionsgleichungen 2 bzw. 3 gezeigten Verfahrensweise hergestellt, während die Verbindungen 20–22 gemäß der Reaktionsgleichung 4 hergestellt wurden. Die Vorstufenverbindungen, $[\text{Au}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}_2]$ und $[\text{Au}(\text{N}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}_2]\text{PF}_6$, wurden wie bei Constable et al., J. Organomet. Chem. 363, 419 (1989) und Cinellu et al., J. Chem. Soc., Dalton Trans. 1261 (2000) offenbart hergestellt, die hiermit durch Bezugnahme zum Inhalt dieser Beschreibung gemacht werden. Die Verbindungen 1–22, mit Ausnahme der Verbindung 18, wurden durch die Umsetzung der jeweiligen Vorstufenverbindungen mit verschiedenen Alkinylierungsmitteln synthetisiert. Die Verbindung 18, wie in Reaktionsgleichung 2 gezeigt, wurde aus der Verbindung 16 hergestellt, wobei die $-\text{Si}(\text{CH}_3)_3$ -Gruppe als Schutzgruppe dient, die durch Umsetzung mit einem Schutzgruppenabspaltungsmittel, wie einem Fluoridion, das ein starkes Nukleophil gegenüber Si ist, entfernt oder "abgespalten" werden kann. Wie in Gleichung 2 angegeben, wird das Fluoridion von Tetrabutylammoniumfluorid oder alternativ einer beliebigen anderen Fluoridionenquelle in Lösung bereitgestellt, die im Handel erhältlich ist. Zum Beispiel wurde zur Herstellung von Verbindung 1 n-Butyllithium (0,90 ml, 1,44 mmol, 1,6 M in Hexan) tropfenweise zu einer Lösung von 4-Methoxyphenylacetylen (159 mg, 1,20 mmol) in Tetrahydrofuran (20 ml) unter einer Stickstoffatmosphäre bei -78°C zugegeben. Die erhaltene Mischung wurde 5 Minuten lang gerührt und in eine Suspension von $[\text{Au}(\text{ppy})\text{Cl}_2]$ (ppy = 2-Phenylpyridin) (127 mg, 0,30 mmol) in Tetrahydrofuran (50 ml) überführt. Das Reaktionsgemisch wurde 3 Stunden lang bei Raumtemperatur gerührt. Das Rohprodukt wurde durch Säulenchromatographie auf Silicagel mit Dichlormethan als Elutionsmittel gereinigt. Durch langsame Diffusion von Diethylether in die Dichlormethanlösung der Verbindungen wurden blassgelbe Kristalle erhalten.

Reaktionsgleichung 1

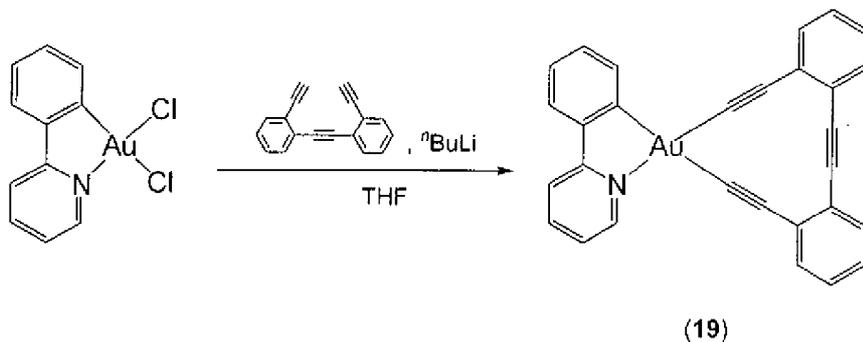


	<u>R</u>	<u>R'</u>	<u>Y</u>	<u>n</u>	<u>R₁</u>
(1)	H	H	C	0	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{OCH}_3-p$
(2)	CH_3	H	C	0	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{OCH}_3-p$
(3)	H	H	N	1	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{OCH}_3-p$
(4)	CH_3	H	C	0	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}_4\text{H}_9-p$
(5)	H	H	C	0	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}_2\text{H}_5-p$
(6)	H	H	C	0	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{CF}_3-p$
(7)	OCH_3	5- CH_3	C	0	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{OCH}_3-p$
(8)	$t\text{Bu}$	H	C	0	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{OCH}_3-p$
(9)	H	H	C	0	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{NH}_2-p$
(10)	CH_3	H	C	0	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{NH}_2-p$
(11)	H	H	C	0	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{N}(\text{CH}_3)_2-p$
(12)	CH_3	H	C	0	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{N}(\text{CH}_3)_2-p$
(13)	OCH_3	H	C	0	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{OCH}_3-p$
(14)	OCH_3	4- CH_3	C	0	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{OCH}_3-p$
(15)	OCH	5- CF_3	C	0	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{OCH}_3-p$
(16)	H	H	C	0	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{Si}(\text{CH}_3)_3$
(17)	CH_3	H	C	0	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{Si}(\text{CH}_3)_3$

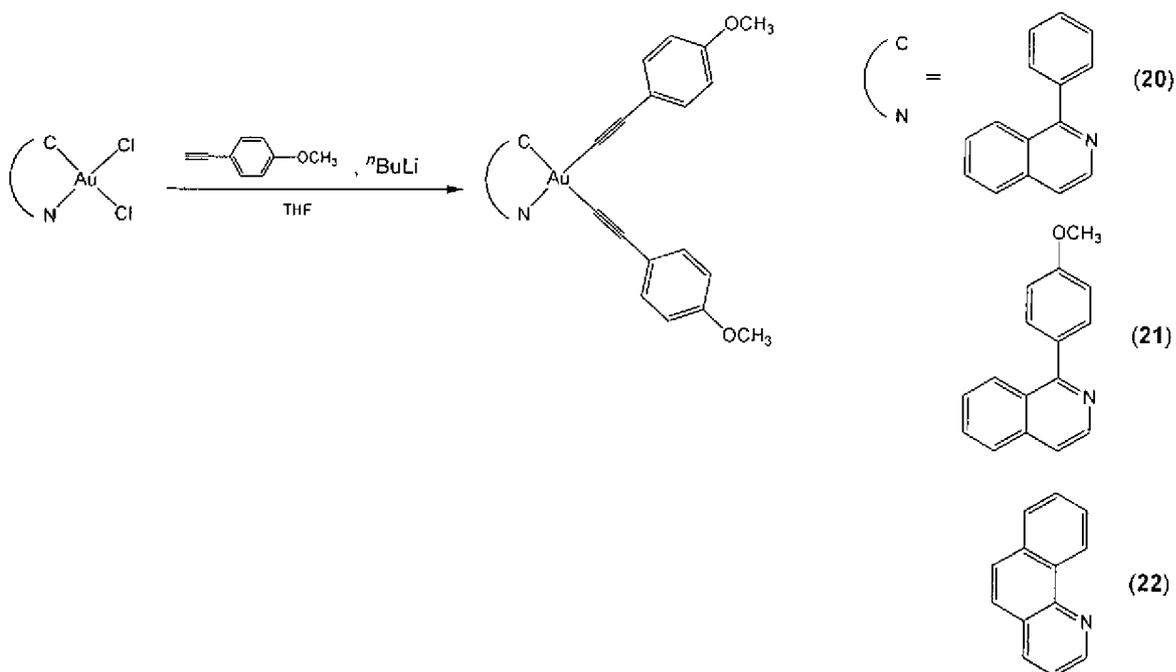
Reaktionsgleichung 2



Reaktionsgleichung 3



Reaktionsgleichung 4



[0047] Die charakteristischen spektroskopischen Eigenschaften der Verbindungen 1–22 sind wie folgt:

Verbindung 1 [Au(ppy) (C≡C-C₆H₄-OCH₃-p)₂] (ppy = 2-Phenylpyridin)

Ausbeute: 33%. ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 3,82 (s, 6H, -OCH₃), 6,85 (m, 4H, phenyl), 7,39 (m, 1H, ppy), 7,41 (m, 2H), 7,50-7,56 (m, 4H, phenyl), 7,67 (d, 5,7 Hz, 1H, ppy), 7,90 (d, 6,0 Hz, 1H, ppy), 8,06 (t, 6,5 Hz, 1H, ppy), 8,30 (d, 7,5 Hz, 1H, ppy), 9,71 (d, 4,8 Hz, 1H, ppy); positive FAB-MS: m/z 614 [M]⁺; IR (KBr): 2120 cm⁻¹, 2167 cm⁻¹; Elementaranalysen ber. für C₂₉H₂₂NO₂Au (gefunden): C 56,78 (56,94), H 3,61 (3,87), N 2,28 (2,32).

Verbindung 2 [Au(pty) (C≡C-C₆H₄-OCH₃-p)₂] (pty = 2-(p-Tolyl)pyridin)

Ausbeute: 60%. ¹H NMR (300 MHz, CDCl₃, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 2,41 (s, 3H, -CH₃), 3,82 (s, 6H, -OCH₃), 6,85 (m, 4H, phenyl), 7,14 (d, 7,9 Hz, 1H, pty), 7,36 (t, 7,2 Hz, 1H, pty), 7,57-7,37 (m, 5H, pty und phenyl), 7,83 (d, 8,0 Hz, 1H, pty), 7,99 (t, 7,5 Hz, 1H, pty), 8,11 (s, 1H, pty), 9,66 (d, 5,7 Hz, 1H, pty); positive FAB-MS: m/z 532 [M]⁺; IR (KBr): 2130 cm⁻¹, 2163 cm⁻¹; Elementaranalysen ber. für C₃₀H₂₄NO₂Au · ½CH₃OH (gefunden): C 56,93 (56,90), H 4,07 (3,87), N 2,18 (2,31).

Verbindung 3 [Au(bpy) (C≡C-C₆H₄-OCH₃-p)₂]PF₆ (bpy = 2,2'-Bipyridin)

Ausbeute: 15%. ¹H NMR (400 MHz, Aceton-d₆, 298 K, relativ zu Me₄Si): 5,373 (s, 6H, -OCH₃), 6,72 (d, 6, 8 Hz, 4H, phenyl), 8,68 (d, 4,0 Hz, 2H, bpy), 7,14 (d, 6,8 Hz, 4H, phenyl), 7,43 (t, 4,8 Hz, 2H, bpy), 7,94 (t, 7,8 Hz, 2H, bpy), 8,47 (d, 8,0 Hz, 2H, bpy).

Verbindung 4 Au(pty) (C≡C-C₆H₄-C₄H₉-p)₂] (pty = 2-(p-Tolyl)pyridin)

Ausbeute: 39%. ¹H NMR (400 MHz, CD₂Cl₂, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 0,94 (m, 6H, -CH₃), 1,38 (m, 4H, -CH₂-), 1,59 (m, 4H, -CH₂-), 2,38 (s, 3H, -CH₃), 2,61 (m, 4H, -CH₂-), 7,15 (m, 5H, pty und phenyl), 7,36 (m, 1H, pty), 7,43 (dd, 8,1 Hz und 4,7 Hz, 4H, phenyl), 7,58 (d, 8,1 Hz, 1H, pty), 7,85 (d, 8,1 Hz, 1H, pty), 7,99 (m, 2H, pty), 9,57 (dd, 1,1 und 4,7 Hz, 1H, pty); positive FAB-MS: m/z 522 [M-C≡CC₆H₄-C₄H₉]⁺; IR (KBr): 2113 cm⁻¹, 2167 cm⁻¹; Elementaranalysen ber. für C₃₆H₃₆NAu (gefunden): C 63,62 (63,80), H 5,34 (5,56), N 2,06 (2,29).

Verbindung 5 [Au(ppy) (C≡C-C₆H₄-C₂H₅-p)₂] (ppy = 2-Penylpyridin)

Ausbeute: 28%. ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 1,24 (s, 6H, -CH₃), 2,65 (m, 4H, -CH₂-), 7,14 (m, 4H, phenyl), 7,38 (m, 3H, ppy), 7,51 (m, 4H, phenyl), 7,66 (d, 7,0 Hz, 1H, ppy), 7,89 (m, 1H, ppy), 8,04 (s, 1H, ppy), 8,27 (d, 7,0 Hz, 1H, ppy), 9,67 (s, 1H, ppy); positive FAB-MS: m/z 609 [M]⁺; IR (KBr): 2136 cm⁻¹, 2163 cm⁻¹; Elementaranalysen ber. für C₃₁H₂₆NAu·½C₅H₁₂ (gefunden): C 62,32 (62,31), H 5,00 (4,60), N 2,17 (2,52).

Verbindung 6 [Au(ppy) (C≡C-C₆H₄-CF₃-p)₂] (ppy = 2-Phenylpyridin)

Ausbeute: 28%. ¹H NMR (400 MHz, CD₂Cl₂, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 7,40 (m, 2H, ppy), 7,48 (m, 1H, ppy), 7,57 (m, 4H, phenyl), 7,65 (m, 4H, phenyl), 7,66 (m, 1H, ppy), 7,94 (d, 8,1 Hz, 1H, ppy), 8,09 (dt, 1,3 und 7,3 Hz, 1H, ppy), 8,17 (dd, 1,3 und 7,3 Hz, ppy); positive FAB-MS: m/z 689 [M]⁺; IR (KBr): 2136 cm⁻¹, 2166 cm⁻¹; Elementaranalysen ber. für C₂₉H₁₆NF₆Au (gefunden): C 50,52 (50,35), H 2,34 (2,36), N 2,03 (2,08).

Verbindung 7 [Au(mpmpy) (C≡C-C₆H₄-OCH₃-p)₂] (mpmpy = 5-Methyl-2-(p-methoxyphenyl)pyridin)

Ausbeute: 30%. ¹H NMR (300 MHz, CD₂Cl₂, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 2,40 (s, 3H, -CH₃), 3,80 (s, 6H, -OCH₃), 3,85 (s, 3H, -OCH₃), 6,85 (m, 5H, mpmpy und phenyl), 7,49 (m, 4H, phenyl), 7,64 (q, 8,3 Hz, 2H, mpmpy), 7,81 (m, 2H, mpmpy), 9,40 (s, 1H, mpmpy); positive FAB-MS: m/z 657 [M]⁺; IR (KBr): 2132 cm⁻¹, 2161 cm⁻¹; Elementaranalysen ber. für C₃₁H₂₆NO₃Au·½H₂O (gefunden): C 55,86 (55,85), H 4,08 (3,94), N 2,10 (2,21).

Verbindung 8 [Au(tbppy) (C≡C-C₆H₄-OCH₃-p)₂] (tbppy = 2-(p-(tert-Butyl)phenyl)pyridin)

Ausbeute: 21%. ¹H NMR (300 MHz, CD₂Cl₂, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 1,36 (s, 9H, ^tBu), 3,80 (s, 6H, -OCH₃), 6,86 (m, 4H, phenyl), 7,40 (m, 2H, tbppy), 7,48 (m, 4H, phenyl), 7,65 (d, 8,2 Hz, 1H, tbppy), 7,89 (d, 7,9 Hz, 1H, tbppy), 8,02 (t, 7,9 Hz, 1H, tbppy), 8,38 (d, 1,9 Hz, 1H, tbppy), 9,64 (d, 5,0 Hz, tbppy); positive FAB-MS: m/z 669 [M]⁺; IR (KBr): 2098 cm⁻¹, 2189 cm⁻¹; Elementaranalysen ber. für C₃₃H₃₀NO₂Au·½H₂O (gefunden): C 58,41 (58,36), H 4,60 (4,60), N 2,06 (1,99).

Verbindung 9 [Au(ppy) (C≡C-C₆H₄-NH₂-p)₂] (ppy = 2-Phenylpyridin)

Ausbeute: 55%. ¹H NMR (400 MHz, DMSO-d₆, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 5,24 (s, 2H, -NH₂), 5,30 (s, 2H, -NH₂), 6,56 (m, 4H, phenyl), 7,17 (dd, 2,5 und 5,6 Hz, 4H, phenyl), 7,41 (m, 2H, ppy), 7,75 (m, 1H, ppy), 8,01 (d, 7,6 Hz, 1H, ppy), 8,16 (d, 7,6 Hz, 1H, ppy), 8,34 (m, 2H, ppy), 9,57 (d, 5,6 Hz, ppy); positive FAB-MS: m/z 584 [M]⁺; Elementaranalysen ber. für C₂₇H₂₀N₃Au·½H₂O (gefunden): C 54,74 (54,81), H 3,57 (3,40), N 7,09 (7,09).

Verbindung 10 [Au(pty) (C≡C-C₆H₄-NH₂-p)₂] (pty = 2-(p-Tolyl)pyridin)

Ausbeute: 19%. ¹H NMR (400 MHz, DMSO-d₆, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 2,38 (s, 3H, -CH₃), 5,28 (s, 2H, -NH₂), 5,35 (s, 2H, -NH₂), 6,54 (m, 4H, phenyl), 7,17 (m, 4H, phenyl), 7,72 (m, 1H, pty), 7,92 (d, 8,0 Hz, 1H, pty), 7,98 (s, 1H, pty), 8,31 (m, 2H, pty), 9,53 (d, 5,6 Hz, 1H); positive FAB-MS: m/z 597 [M]⁺; Elementaranalysen ber. für O₂₈H₂₂N₃Au·½H₂O (gefunden): C 56,29 (55,99), H 3,71 (3,74), N 7,03 (7,00).

Verbindung 11 [Au(ppy) (C≡C-C₆H₄-N(CH₃)₂-p)₂] (ppy = 2-Phenylpyridin)

Ausbeute: 22%. ¹H NMR (400 MHz, DMSO-d₆, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 2,91 (s, 6H, -N(CH₃)₂), 3,21 (s, 6H, -N(CH₃)₂), 6,58 (d, 8,9 Hz, 2H, phenyl), 7,06 (d, 8,7 Hz, 2H, phenyl), 7,23 (d, 8,9 Hz, 2H, phenyl), 7,51 (d, 8,7 Hz, 2H, phenyl), 7,66 (t, 7,9 Hz, 2H, ppy), 7,79 (d, 7,9 Hz, 1H, ppy), 7,85 (t, 8,2 Hz, 1H, ppy), 8,20 (t, 8,5 Hz, 1H, ppy), 8,73 (d, 7,9 Hz, 1H, ppy), 8,86 (d, 7,2 Hz, 1H, ppy), 9,07 (d, 8,2 Hz, 1H, ppy); positive FAB-MS: m/z 639 [M]⁺; Elementaranalysen ber. für C₃₁H₂₈AuN₃·2H₂O (gefunden): C 55,11 (55,04); H 4,77 (4,45); N 6,22 (6,03).

Verbindung 12 [Au(pty) (C≡C-C₆H₄-N(CH₃)₂-p)₂] (pty = 2-(p-Tolyl)pyridin)

Ausbeute: 31%. ¹H NMR (300 MHz, CD₂Cl₂, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 2,63 (s, 3H, -CH₃), 2,89 (s, 6H, -N(CH₃)₂), 3,08 (s, 6H, -N(CH₃)₂), 6,56 (d, 8,7 Hz, 2H, phenyl), 6,92 (d, 8,7 Hz, 2H, phenyl), 7,19 (d, 8,6 Hz, 2H, phenyl), 7,43 (d, 8,6 Hz, 2H, phenyl), 7,48 (d, 6,8 Hz, 1H, pty), 7,65 (d, 8,9 Hz, 1H, pty), 8,03 (t, 7,6 Hz, 1H, pty), 8,56 (d, 8,4 Hz, 1H, pty), 8,75 (d, 7,3 Hz, 1H, pty), 8,89 (d, 8,4 Hz, 1H, pty), 8,94 (s, 1H, pty); positive-ion FAB-MS: m/z 654 [M]⁺; Elementaranalysen ber. für C₃₂H₃₆AuN₃·½CH₂Cl₂ (gefunden): C, 56,08 (56,02); H, 4,49 (4,40); N, 6,04 (6,17).

Verbindung 13 [Au(mppy) (C≡C-C₆H₄-OCH₃-p)₂] (mppy = 2-(p-Methoxyphenyl)pyridin)

Ausbeute: 14%. ¹H NMR (300 MHz, CD₂Cl₂, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 3,80 (s, 6H, -OCH₃), 3,87 (s, 3H, -CH₃), 6,85 (m, 5H, phenyl und mppy), 7,33 (t, 7,8 Hz, 1H, mppy), 7,47 (m, 4H, phenyl), 7,68 (d, 7,8 Hz, 1H, mppy), 7,78 (d, 7,8 Hz, 1H, mppy), 7,85 (d, 2,6 Hz, 1H, mppy), 8,00 (t, 7,8 Hz, 1H, mppy), 9,56 (m, 1H, mppy); positive FAB-MS: m/z 643 [M]⁺; IR (KBr): 2131 cm⁻¹, 2162 cm⁻¹; Elementaranalysen ber. für C₃₀H₂₄AuNO₃·½H₂O (gefunden): C 55,22 (55,42), H 3,86 (3,82), N 2,15 (2,19).

Verbindung 14 [Au(4-mpmepy) (C≡C-C₆H₄-OCH₃-p)₂] (4-mpmepy = 4-Methyl-2-(p-methoxyphenyl)pyridin)

Ausbeute: 26%. ¹H NMR (300 MHz, CD₂Cl₂, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 2,50 (s, 3H, -CH₃), 3,80 (s, 6H, -OCH₃), 3,86 (s, 3H, -OCH₃), 6,85 (m, 5H, phenyl und 4-mpmepy), 7,12 (d, 6,1 Hz, 1H, 4-mpmepy), 7,46 (m, 4H, phenyl), 7,56 (s, 1H, 4-mpmepy), 7,64 (d, 8,7 Hz, 1H, 4-mpmepy), 7,82 (d, 2,7 Hz, 1H, 4-mpmepy), 9,35 (d, 6,1 Hz, 1H, 4-mpmepy); positive FAB-MS: m/z 658 [M]⁺; IR (KBr): 2129 cm⁻¹, 2160 cm⁻¹; Elementaranalysen ber. für C₃₀H₂₄NO₂Au·½H₂O (gefunden): C 56,61 (56,26), H 3,96 (4,09), N 2,20 (2,22).

Verbindung 15 [Au(mptfpy) (C≡C-C₆H₄-OCH₃-p)₂] (mptfpy = 5-Trifluormethyl-2(p-methoxyphenyl)pyridin)

Ausbeute: 22%. ¹H NMR (300 MHz, CD₂Cl₂, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 3,80 (s, 6H, -OCH₃), 3,88 (s, 3H, -OCH₃), 6,84-6,91 (m, 5H, phenyl und mptfpy), 7,43-7,50 (m, 4H, phenyl), 7,75 (d, 8,5 Hz, 1H, mptfpy), 7,82 (d, 2,6 Hz, 1H, mptfpy), 7,90 (d, 7,9 Hz, 1H, mptfpy), 8,17 (d, 8,5 Hz, 1H, mptfpy), 9,96 (s, 1H, mptfpy); positive FAB-MS: m/z 712 [M]⁺; IR (KBr): 2138 cm⁻¹, 2161 cm⁻¹; Elementaranalysen ber. für C₃₁H₂₃NO₃F₃Au·½CH₂Cl₂ (gefunden): C 50,18 (50,35), H 3,21 (3,14), N 1,86 (1,97).

Verbindung 16 [Au(ppy) (C≡C-Si(CH₃)₃)₂] (ppy = 2-Phenylpyridin)

Ausbeute: 12%. ¹H NMR (400 MHz, CD₂Cl₂, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 0,23 (s, 9H, -Si(CH₃)₃), 0,25 (s, 9H, -Si(CH₃)₃), 7,31-7,43 (m, 3H, ppy), 7,69 (dd, 1,4 und 7,5 Hz, 1H, ppy), 7,91 (d, 8,1 Hz, 1H, ppy), 8,06 (m, 1H, ppy), 8,13 (dd, 1,4 und 7,5 Hz, 1H, ppy), 9,58 (d, 5,7 Hz, 1H, ppy); positive FAB-MS: m/z 546 [M]⁺; IR (KBr): 2075 cm⁻¹, 2098 cm⁻¹; Elementaranalysen ber. für C₂₁H₂₆NSi₂Au·½H₂O (gefunden): C 45,48 (45,12), H 4,71 (4,91), N 2,67 (2,53).

Verbindung 17 [Au(pty) (C≡C-Si(CH₃)₃)₂] (pty = 2-(p-Tolyl)pyridin)

Ausbeute: 15%. ¹H NMR (400 MHz, CD₂Cl₂, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 0,23 (s, 9H, -Si(CH₃)₃), 0,27 (s, 9H, Si(CH₃)₃), 2,37 (s, 3H, -CH₃), 7,14 (d, 7,9 Hz, 1H, ppy), 7,35 (t, 6,1 Hz, 1H, ppy), 7,57 (d, 7,9 Hz, 1H, ppy), 7,84 (d, 7,9 Hz, 1H, ppy), 7,97 (s, 1H, ppy), 8,02 (m, 1H, ppy), 9,54 (d, 4,9 Hz, 1H, ppy); positive FAB-MS: m/z 560 [M]⁺; IR (KBr): 2075 cm⁻¹, 2098 cm⁻¹; Elementaranalysen ber. für C₂₂H₂₈NSi₂Au·½H₂O (gefunden): C 46,47 (46,50), H 5,14 (5,07), N 2,46 (2,46).

Verbindung 18 [Au(ppy) (C≡C-H)₂] (ppy = 2-Phenylpyridin)

Ausbeute: 48%. ¹H NMR (300 MHz, CD₂Cl₂, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 2,44 (s, 1H, -C≡C-H), 2,78 (s, 1H, -C≡C-H), 7,36-7,49 (m, 3H, ppy), 7,72 (d, 7,0 Hz, 1H, ppy), 7,94 (d, 8,1 Hz, 1H, ppy), 8,11 (m, 1H, ppy), 8,17 (dd, 2,0 und 6,5 Hz, 1H, ppy), 9,62 (6,5 Hz, 1H, ppy).

Verbindung 19 [Au(ppy) (tda)] (ppy = 2-Phenylpyridin; tda = Tolan-2,2'-diacetylid)

Ausbeute: 39%. ¹H NMR (400 MHz, DMSO-d₆, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 7,40-7,50 (m, 6H, phenyl), 7,65-7,68 (m, 2H, phenyl), 7,70-7,73 (m, 2H, ppy), 7,77 (t, 7,4 Hz, 1H, ppy), 8,07 (d, 7,5 Hz, 1H, ppy), 8,20 (dd, 1,3 und 7,9 Hz, 1H ppy), 8,35-8,43 (m, 2H, ppy), 9,50 (d, 6,2 Hz, 1H, ppy); positiv-ion FAB MS: m/z 576 [M + 1]⁺; Elementaranalysen ber. für C₂₉H₁₆AuN·1½ZnO (gefunden): C, 57,82 (57,89); H, 2,94 (3,18); N, 2,33 (2,43).

Verbindung 20 [Au(piq) (C≡C-C₆H₄-OCH₃)₂] (piq = 1-Phenylisochinolin)

Ausbeute: 36%. ¹H NMR (300 MHz, CD₂Cl₂, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 3,80 (s, 6H, -OCH₃), 6,85 (m, 4H, phenyl), 7,45 (m, 6H, phenyl und piq), 7,77 (d, 6,4 Hz, 1H, piq), 7,84 (d, 8,5 Hz, 1H, piq), 7,91 (t, 6,5 Hz, 1H, piq), 8,00 (d, 8,5 Hz, 1H, piq), 8,24 (d, 7,2 Hz, 1H, piq), 8,39 (dd, 2,1 und 7,2 Hz, 1H, piq), 8,90 (d, 8,5 Hz, 1H, piq), 9,59 (d, 6,4 Hz, 1H, piq); positive FAB-MS: m/z 664 [M]⁺; IR (KBr): 2129 cm⁻¹, 2160 cm⁻¹; Elementaranalysen ber. für C₃₃H₂₄NO₂Au·CH₂Cl₂ (gefunden): C 54,56 (54,99), H 3,50 (3,54), N 1,87 (2,27).

Verbindung 21 [Au(mpiq) (C≡C-C₆H₄-OCH₃)₂] (mpiq = 1-(p-Methoxyphenyl)isochinolin)

Ausbeute: 56%. ¹H NMR (400 MHz, CD₂Cl₂, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 3,81 (s, 6H, -OCH₃), 3,92 (s, 3H, -OCH₃), 6,85 (m, 4H, phenyl), 6,92 (dd, 2,8 und 8,8 Hz, 1H, mpiq), 7,48 (m, 4H, phenyl), 7,64 (d, 6,8 Hz, 1H, mpiq), 7,78 (t, 6,8 Hz, 1H, mpiq), 7,88 (t, 6,8 Hz, 1H, mpiq), 7,94 (d, 7,8 Hz, 1H, mpiq), 8,01 (d, 2,8 Hz, 1H, mpiq), 8,20 (d, 9,0 Hz, 1H, mpiq), 8,82 (d, 8,8 Hz, 1H, mpiq), 9,48 (d, 6,8 Hz, 1H, mpiq); positive FAB-MS: m/z 694 [M]⁺; IR (KBr): 2129 cm⁻¹, 2162 cm⁻¹; Elementaranalysen ber. für C₃₄H₂₆AuNO₃·½H₂O (gefunden): C 58,13 (58,17), H 3,87 (3,80), N 1,99 (1,98).

Verbindung 22 [Au(bzq) (C≡C-C₆H₄-OCH₃)₂] (bzq = 7,8-Benzochinolin)

Ausbeute: 56%. ¹H NMR (300 MHz, CD₂Cl₂, 298 K, relativ zu Me₄Si): δ 3,81 (s, 6H, -OCH₃), 6,88 (m, 4H, phenyl), 7,53 (m, 4H, phenyl), 7,76 (m, 3H, bzq), 7,85 (d, 8,1 Hz, 1H, bzq), 7,92 (d, 8,1 Hz, 1H, bzq), 8,38 (d, 7,1 Hz, 1H, bzq), 8,56 (d, 8,1 Hz, 1H, bzq), 9,82 (d, 5,3 Hz, 1H, bzq); positive FAB-MS: m/z 694 [M]⁺; IR (KBr): 2127 cm⁻¹, 2160 cm⁻¹; Elementaranalysen ber. für C₃₁H₂₂AuNO₂·H₂O (gefunden): C 56,80 (56,88), H 3,69 (3,46), N 2,14 (2,20).

UV-Vis-Absorptionseigenschaften

[0048] Erfindungsgemäße Gold(III)-Verbindungen zeigen gute Lumineszenz bei Temperaturen bis zur normalen Raumtemperatur in verschiedenen Medien. Die photophysikalischen Daten ausgewählter Verbindungen sind in Tabelle 1 zusammengefasst. Die UV-vis-Absorptionsspektren der Verbindungen 1 und 2 sind in Fig. 2 als repräsentative Beispiele dargestellt, bei denen die Verbindungen 1 und 2 in Dichlormethanol bei 298 K nur ein intensives strukturloses Band bei ca. 326 nm bzw. 330 nm zeigen. Der Ursprung der Absorption bei 326–330 nm wird tentativ einem Intraliganden(IL)-π-π*-Übergang des bidentaten C[^]N-Liganden zugeschrieben. Die Verbindung 1 zeigt eine niedrigere Absorptionsenergie als die Verbindung 2, vermutlich aufgrund der als Elektronendonator wirkenden Methylgruppe am Phenylring des C[^]N-Liganden, was die HOMO-LUMO-Energielücke für den Übergang durch ein stärkeres Anheben der Energie des HOMO-π-Orbitals im Vergleich zum LUMO-π*-Orbital einengt.

Photolumineszenzeigenschaften

[0049] Im Gegensatz zu den meisten Au(III)-Verbindungen, die keine Emission oder nur Lumineszenz bei niedriger Temperatur zeigen, weist diese Klasse von Verbindungen im Lösungszustand bei Raumtemperatur eine intensive Lumineszenz bei 462–697 nm auf (Tabelle 1). Wie in den jeweiligen Emissionsspektren in Fig. 3 dargestellt ist, zeigen die Verbindungen 1 und 2 intensive vibronisch strukturierte Emissionsbänder bei 460–505 nm. Die Abstände von Vibrationsausbreitungen liegen im Bereich von 1225–1260 cm⁻¹, die Streckschwingungsfrequenzen von C=C und C=N zugeordnet sind, was nahelegt, dass die Zuordnung der vibronisch strukturierten Bänder auf einem metall-beeinflussten Intraligandenzustand ³[π-π*] des C[^]N-Liganden beruht.

Im Vergleich zu Verbindung 1 zeigt Verbindung 2 eine rote Verschiebung in der Emission, die mit der Untersuchung der Elektronenabsorption übereinstimmt und vermutlich durch den als Elektronendonator wirkenden Methylsubstituenten des C^N-Liganden bedingt ist, der die HOMO-LUMO-Energielücke für den π - π^* -Übergang verringert.

TABELLE 1

Photophysikalische Daten für ausgewählte Verbindungen

Verbindung	Medium (T/K)	Absorption λ_{\max}/nm ($\epsilon_{\max}/\text{dm}^3\text{mol}^{-1}\text{cm}^{-1}$)	Emission λ_{\max}/nm
1	CH ₂ Cl ₂ (298)	326 (17365)	464, 492, 524sh
2	CH ₂ Cl ₂ (298)	330 (16175)	473, 503, 540sh
4	CH ₂ Cl ₂ (298)	324 (20575)	472, 502, 534sh
5	CH ₂ Cl ₂ (298)	320 (16905)	462, 493, 524sh
6	CH ₂ Cl ₂ (298)	330sh (9685)	464, 493, 522sh
7	CH ₂ Cl ₂ (298)	330sh (16265)	491, 520, 556sh
8	CH ₂ Cl ₂ (298)	330 (21650)	470, 500, 532sh
9	CH ₂ Cl ₂ (298)	332sh (19260)	592
13	CH ₂ Cl ₂ (298)	330 (15820)	487, 514, 553sh
14	CH ₂ Cl ₂ (298)	326sh (15530)	479, 507, 549sh
20	CH ₂ Cl ₂ (298)	362 (13565)	582, 621
21	CH ₂ Cl ₂ (298)	398 (27835)	592, 632, 697sh

BEISPIEL 2

[0050] Photolumineszenz(PL)-Eigenschaften der lumineszierenden Gold(III)-Verbindungen in einem festen Dünnfilm wurden durch Dotieren von 20 Gew.-% Verbindung 2 in eine Wirtsmatrix mit hoher Triplett-Energie, die durch Vermischen von 70 Gew.-% Poly-N-vinylcarbazol (PVK) mit 30 Gew.-% 2-(4-Butylphenyl)-5-(4-tert-biphenyl)-1,2,3-oxadiazol (Butyl-PBD) gebildet ist, untersucht. Das mit Farbstoff dotierte Blend von PVK: Butyl-PBD wurden aus einer Lösung von 28 mg/ml (Gesamtfeststoff) in 1,2-Dichlorethan (DCE) bei 3000 Upm in 30 Sekunden durch Spinbeschichten auf ein Quarzsubstrat aufgebracht, so dass sich ein Dünnfilm von 70 nm ausbildet. Das PL-Spektrum wurde auf einem Fluoreszenzspektrofluorometer Spex Fluorolog-2 Modell F-111 aufgenommen, das mit einer Photomultierröhre Hamamatsu R-928 ausgerüstet ist.

BEISPIEL 3

[0051] Es wurden die gleichen Materialien und Verfahrensweisen wie in Beispiel 2 beschrieben eingesetzt, mit der Ausnahme, dass ein reines undotiertes 70 Gew.-% PVK:30 Gew.-% Butyl-PBD anstelle des mit Farbstoff dotierten Dünnfilms verwendet wurde. Fig. 4 zeigt ein Photolumineszenzspektrum der mit Farbstoff dotierten und undotierten PVK:Butyl-PBD-Dünnfilme. Wie in Fig. 4(a) zu sehen ist, zeigt der undotierte PVK:Butyl-PBD-Dünnfilm eine intensive tiefblaue Emission mit einem dominanten Peak bei 437 nm, der den Koordinaten (0,16, 0,10) der Commission Internationale de l'Eclairage (CIE) entspricht. Der mit Farbstoff dotierte Dünnfilm zeigt einen weiteren Peak bei 554 nm, von dem zu erwarten ist, dass er von Verbindung 2 kommt, wie es in Fig. 4(b) gezeigt ist. Insbesondere wurde eine weiße Emission mit CIE von (0,28, 0,35) erhalten, als die Verbindung 2 in eine PVK:Butyl-PBD-Matrix dotiert wurde.

BEISPIEL 4

[0052] Ein OLED-Element gemäß einer Ausführungsform der Erfindung wurde auf die folgende Weise konstruiert:

- ein Glassubstrat mit transparenter Anode und ITO-Beschichtung wurde durch Ultraschall in einem handelsüblichen Reinigungsmittel gereinigt, mit deionisiertem Wasser gespült und dann in einem Ofen getrocknet. Das Substrat wurde anschließend 15 Minuten lang einer UV-Ozon-Behandlung unterzogen;
- das Substrat wurde in eine Vakuumkammer gesetzt und die Kammer auf 5×10^{-6} mbar abgepumpt;

- c) eine 70 nm dicke Löchertransportschicht aus N,N'-Di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidin (NPB) wurde auf dem mit ITO beschichteten Glassubstrat abgeschieden,
- d) eine 5 nm dicke Trägersperrschicht aus CBP wurde auf der NPB-Schicht abgeschieden;
- e) eine 30 nm dicke dotierte CBP-Lichtemissionsschicht wurde auf der CBP-Schicht abgeschieden, in der 2, 4, 6, 8 und 10 v/v-% Verbindung 1 in die Licht emittierende CBP-Schicht dotiert wurden;
- f) eine 30 nm dicke Elektronentransportschicht aus Aluminium(III)-bis(2-methyl-8-chinolinato)-4-phenylphenolat (BALq) wurde auf der dotierten Licht emittierenden CBP-Schicht abgeschieden;
- g) ein 0,5 nm dickes LiF und ein 200 nm dickes Al wurden auf der BALq-Schicht als Elektroneninjektionskathode abgeschieden.

[0053] Alle Materialien wurden durch thermisches Verdampfen aus Tantalschiffchen hergestellt. Die Abscheidungsraten wurden mit einem Quarzoszillationskristall überwacht und für organische und metallische Schichten auf 0,1 bis 0,2 nm/s eingeregelt. Die Stromdichte-Spannung-Lumineszenz(J-V-L-)Charakteristiken der OLED-Elemente wurden mit einer programmierbaren Energiequelle von Keithley Modell 2420 und einem Colorimeter Spectrascan PR655 unter Raumluftbedingungen gemessen.

[0054] Fig. 5 zeigt die EL-Spektren für Elemente aus Beispiel 4, bei denen die Konzentration an Verbindung 1, die in ein CBP-Wirtsmaterial eindotiert ist, zwischen 2 bis 10% liegt, Bemerkenswert ist, dass alle Leuchtelemente breite EL-Spektren mit Emissionspeaks bei ca. 448, 485 und 518 nm zeigen. Mit zunehmender Konzentration an Verbindung 1 fallen die relativen Intensitäten von 484 und 518 nm. Dies entspricht einer Farbveränderung in CIE-Koordinaten von (0,17, 0,16) auf (0,17, 0,11) und einer Abnahme der Halbwertsbreite von 76 nm (3688 cm^{-1}) auf 63 nm (3119 cm^{-1}), wenn die Konzentration an Verbindung 1 von 2 auf 10% steigt. Dies demonstriert, dass die lumineszierenden Gold(III)-Verbindungen gemäß Ausführungsformen der vorliegenden Erfindung effektiv als Phosphoreszenz-Dotierungsmittel für die Herstellung von OLEDs verwendet werden können.

[0055] Alle Patente, Patentanmeldungen, vorläufigen Anmeldungen und Veröffentlichungen, auf die hierin Bezug genommen wurde oder die zitiert wurden, werden durch Bezugnahme in vollem Umfang, einschließlich aller Figuren und Tabellen, zum Bestandteil der vorliegenden Beschreibung gemacht, soweit sie nicht im Widerspruch zu der ausdrücklichen Lehre dieser Beschreibung stehen.

[0056] Es versteht sich, dass die hier beschriebenen Beispiele und Ausführungsformen nur dem Zwecke der Erläuterung dienen, und dass für Fachleute in ihrem Lichte verschiedene Modifikationen oder Änderungen ersichtlich sind, die vom Geiste und vom Bereich dieser Anmeldung umfasst sind.

ZITATE ENTHALTEN IN DER BESCHREIBUNG

Diese Liste der vom Anmelder aufgeführten Dokumente wurde automatisiert erzeugt und ist ausschließlich zur besseren Information des Lesers aufgenommen. Die Liste ist nicht Bestandteil der deutschen Patent- bzw. Gebrauchsmusteranmeldung. Das DPMA übernimmt keinerlei Haftung für etwaige Fehler oder Auslassungen.

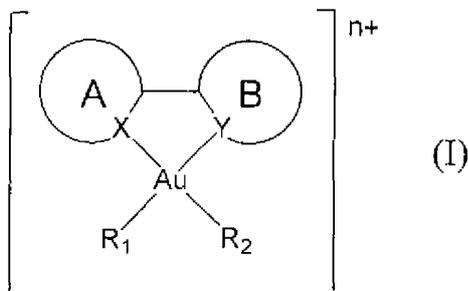
Zitierte Nicht-Patentliteratur

- Burrows, P. E.; Forrest, S. R.; Thompson, M. E. Current Opinion in Solid State and Materials Science, 236 (1997) [0005]
- Kaneto, K.; Yoshino, K.; Koa, K.; Inuishi, Y. Jpn. J. Appl. Phys. 18, 1023 (1974) [0006]
- Burroughs, J. H.; Bradley, D. D. C.; Brown, A. R.; Marks, N.; Friend, R. H.; Burn, P. L.; Holmes, A. B. Nature 347, 539 (1990) [0006]
- Braun, D.; Heeger, A. J. Appl. Phys. Lett. 58, 1982 (1991) [0006]
- Helfruch, W.; Schneider, W. G. Phys. Rev. Lett. 14, 229 (1965) [0007]
- Tang, C. W.; VanSlyke, S. A. Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987) [0007]
- Baldo, M. A.; Thompson, M. E.; Forrest, S. R. Pure Appl. Chem. 71, 2095 (1999) [0008]
- Baldo et al. [0008]
- Baldo, M. A.; O'Brien, D. F.; You, Y.; Shoustikow, A.; Sibley, S.; Thompson, M. E.; Forrest, S. R. Nature 395, 151 (1998) [0008]
- O'Brien, D. F.; Baldo, M. A.; Thompson, M. E.; Forrest, S. R. Appl. Phys. Lett. 74, 442 (1999) [0008]
- Baldo et al. [0009]
- Baldo, M. A.; Lamansky, S.; Burrows, P. E.; Thompson, M. E.; Forrest, S. R. Appl. Phys. Lett. 75, 4 (1999) [0009]
- Rausch, A. F.; Thompson, M. E.; Yersin, H. Inorg. Chem. 48, 1928 (2009) [0009]
- Adachi, C.; Kwong, R. C.; Djurovich, P. I.; Adamovich, V.; Baldo, M. A.; Thompson, M. E.; Forrest, S. R. Appl. Phys. Lett. 79, 2082 (2001) [0009]
- Kawamura, Y.; Goushi, K.; Brooks, J.; Brown, J. J.; Sasabe, H.; Adachi, C. Appl. Phys. Lett. 86, 071104 (2005) [0009]
- Welter et al. [0010]
- Welter, S.; Krunner, K.; Hofstraat, J. W.; De Cola, D. Nature, 421, 54 (2003) [0010]
- Adamovich et al. [0010]
- Adamovich, V.; Brooks, J.; Tamayo, A.; Alexander, A. M.; Djurovich, P. R.; D'Andrade, B. W.; Adachi, C.; Forrest, S. R.; Thompson, M. E. New J. Chem. 26, 1171 (2002) [0010]
- Yam et al. [0011]
- Yam, V. W. W.; Choi, S. W. K.; Lai, T. F.; Lee, W. K. J. Chem. Soc., Dalton Trans. 1001 (1993) [0011]
- Cinellu, M. A.; Minghetti, G.; Pinna, M. V.; Stoccoro, S.; Zucca, A.; Manassero, M. J. Chem. Soc. Dalton Trans. 2823 (1999) [0011]
- Yam et al. [0011]
- Yam, V. W.-W.; Wong, K. M.-C.; Hung, L.-L.; Zhu, N. Angew. Chem. Int. Ed. 44, 3107 (2005) [0011]
- Wong, K. M.-C.; Zhu, K.; Hung, L.-L.; Zhu, N.; Yam, V. W.-W.; Kwok, H. S. Chem. Commun. 2906 (2005) [0011]
- Wong, K. M.-C.; Hung, L.-L.; Lam, W. H.; Zhu, N.; Yam, V. W.-W. J. Am. Chem. Soc. 129, 4350 (2007) [0011]
- Constable et al., J. Organomet. Chem, 363, 419 (1989) [0043]
- Cinellu et al., J. Chem. Soc., Dalton Trans. 1261 (2000) [0043]
- Constable et al., J. Organomet. Chem. 363, 419 (1989) [0046]
- Cinellu et al., J. Chem. Soc., Dalton Trans. 1261 (2000) [0046]

Patentansprüche

1. Lumineszierende Gold(III)-Verbindung, umfassend:
 ein Gold(III)-Metallzentrum,
 einen bidentaten Liganden, der mit dem Metallzentrum durch Donoratome des bidentaten Liganden koordiniert ist, und
 mindestens eine starke Kohlenstoffdonorgruppe als σ -Donator, die am Gold(III)-Metallzentrum angelagert ist.

2. Gold(III)-Verbindung nach Anspruch 1, wobei die Verbindung die chemische Struktur aufweist:



worin:

X ein Stickstoff und Y ein Kohlenstoff oder ein Stickstoff ist,

A-B ein substituierter oder unsubstituierter Cyclometallatligand (für Y=C) oder Diiminligand (für Y=N) ist,

A und B cyclische Strukturderivate sind,

R₁ und R₂ unabhängig optional substituierte Kohlenstoffdonorliganden sind und optional zu einem bidentaten Liganden kombiniert sind, wobei R₁ und R₂ nicht -CH₃, -CH₂SiMe₃, Mesityl, Pentafluorphenyl, -CH₂C(O)CH₃, -CH(COPh)SO₂(COPh)CH-, -CH(CN)SO₂(CN)CH- oder -C₆H₄N=NC₆H₅ sind, und n größer oder gleich Null ist.

3. Gold(III)-Verbindung nach Anspruch 2, wobei R₁ und R₂ unabhängig Alkynyl, substituiertes Alkynyl, Arylalkynyl und substituiertes Arylalkynyl sind.

4. Gold(III)-Verbindung nach Anspruch 2, wobei der Ring A ein 5- oder 6-gliedriger Heteroaromat oder Heterocyclus ist und der Ring B ein 5- oder 6-gliedriger Aromat oder ein zweiter Heteroaromat oder Heterocyclus ist.

5. Gold(III)-Verbindung nach Anspruch 4, wobei die Aromaten oder Heteroaromaten unabhängig Benzol, Pyridin, Thiophen, Furan, Pyrazol, Imidazol, Oxazol, Isoxazol, Thiazol, Isothiazol, Isochinolin, Pyrrol, Pyrazin, Pyridazin, Pyrimidin, Benzimidazol, Benzofuran, Benzothiazol, Indol, Naphthalen, Anthracen, Pyren, Triazol, Tetrazol, Pyran, Thiapyran, Oxadiazol, Triazin, Tetrazin, Carbazol, Dibenzothiophen, Dibenzofuran, Fluoren oder Derivate davon sind, und wobei die Ringe A und B unsubstituiert sind oder worin einer oder beide Ringe A und B mindestens einen Substituenten aufweisen, der eine Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkylaryl-, Cycloalkyl-, OR-, NR₂-, SR-, C(O)R-, C(O)OR-, C(O)NR₂-, CN-, CF₃-, NO₂-, SO₂-, SOR-, SO₃R-, Halogen-, Aryl-, substituierte Aryl-, Heteroaryl-, substituierte Heteroaryl- oder Heterocyclengruppe umfasst.

6. Gold(III)-Verbindung nach Anspruch 4, wobei mindestens einer der Ringe A und B unabhängig benachbarte Positionen aufweist, die in Kombination eine fusionierte 5- oder 6-gliedrige cyclische Gruppe bilden, wobei die cyclische Gruppe Cycloalkyl, Cycloheteroalkyl, Aryl oder Heteroaryl ist, und wobei die fusionierte 5- oder 6-gliedrige cyclische Gruppe optional mit einem oder mehreren aus Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkylaryl-, Cycloalkyl-, CN-, CF₃-, C(O)OR-, C(O)R-, NR₂-, NO₂-, OR- oder Halogensubstituenten substituiert ist, wobei R unabhängig Alkyl, Alkenyl, Alkynyl, Alkylaryl, Aryl oder Cycloalkyl ist.

7. Gold(III)-Verbindung nach Anspruch 2, wobei der Cyclometallatligand, A-B, 2-Phenylpyridine, Phenyliso-chinoline, Phenylpyrazole, 7,8-Benzochinoline oder ein beliebiges Derivat davon umfasst, wobei das Derivat mit mindestens einer Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkylaryl-, Cycloalkyl-, OR-, NR₂-, SR-, C(O)R-, C(O)OR-, C(O)NR₂-, CN-, CF₃-, NO₂-, SO₂-, SOR-, SO₃R-, Halogen-, Aryl-, substituierten Aryl-, Heteroaryl-, substituierten Heteroaryl- oder einer Heterocyclengruppe substituiert ist, und wobei, optional, zwei beliebige benachbarte substituierte Positionen der Ringe A und/oder B in Kombination, unabhängig, eine fusionierte 5- oder 6-gliedrige cyclische Gruppe bilden, wobei die cyclische Gruppe Cycloalkyl, Cycloheteroalkyl, Aryl oder Heteroaryl ist, und wobei die fusionierte 5- oder 6-gliedrige cyclische Gruppe optional mit einem oder mehreren aus Alkyl, Alkenyl, Alkynyl, Alkylaryl, Cycloalkyl, OR, C(O)R, C(O)OR, C(O)NR₂, CN, CF₃, NR₂, NO₂, SR, SO₂, SOR, SO₃R

oder Halogen substituiert ist, wobei R unabhängig Alkyl, Alkenyl, Alkynyl, Alkylaryl, Aryl oder Cycloalkyl ist oder wobei der Diiminligand, A-B, 2,2'-Bipyridine, 1,10-Phenanthroline oder ein Derivat davon umfasst, wobei das Derivat mit einer oder mehreren Alkyl-, Alkenyl-, Alkynyl-, Alkylaryl-, Cycloalkyl-, OR-, NR₂-, SR-, C(O)R-, C(O)OR-, C(O)NR₂-, CN-, CF₃-, NO₂-, SO₂-, SOR-, SO₃R-, Halogen-, Aryl-, substituierten Aryl-, Heteroaryl-, substituierten Heteroaryl- oder Heterocyclengruppen substituiert ist, und wobei, optional, zwei beliebige benachbarte substituierte Positionen der Ringe A und/oder B in Kombination, unabhängig, eine fusionierte 5- oder 6-gliedrige cyclische Gruppe bilden, wobei die cyclische Gruppe Cycloalkyl, Cycloheteroalkyl, Aryl oder Heteroaryl ist, und wobei die fusionierte 5- oder 6-gliedrige cyclische Gruppe optional mit einem oder mehreren aus Alkyl, Alkenyl, Alkynyl, Alkylaryl, Cycloalkyl, OR, C(O)R, C(O)OR, O(O)NR₂, ON, CF₃, NR₂, NO₂, SR, SO₂, SOR, SO₃R oder Halogen substituiert ist, wobei R unabhängig Alkyl, Alkenyl, Alkynyl, Alkylaryl, Aryl oder Cycloalkyl ist.

8. Gold(III)-Verbindung nach Anspruch 2, wobei die Gold(III)-Verbindung Photolumineszenzeigenschaften und/oder Elektrolumineszenzeigenschaften aufweist.

9. Gold(III)-Verbindung nach Anspruch 2, wobei die Gold(III)-Verbindung Au(2-phenylpyridin) (C≡C-C₆H₄-OCH₃-p)₂, Au(2-(p-tolyl)pyridin) (C≡C-C₆H₄-OCH₃-p)₂, Au(2,2'-bipyridin) (C≡C-C₆H₄-OCH₃-p)₂, Au(2-(p-tolyl)pyridin) (C≡C-C₆H₄-C₄H₉-p)₂, Au(2-phenylpyridin) (C≡C-C₆H₄-C₂H₅-p)₂, Au(2-phenylpyridin) (C≡C-C₆H₄-CF₃-p)₂, Au(5-methyl-2-p-(methoxyphenyl)pyridin) (C≡C-C₆H₄-OCH₃-p)₂, Au(2-(p-(tert-butyl)phenyl)pyridin) (C≡C-C₆H₄-OCH₃-p)₂, Au(2-phenylpyridin) (C≡C-C₆H₄-NH₂-p)₂, Au(2-(p-tolyl)pyridin) (C≡C-C₆H₄-NH₂-p)₂, Au(2-phenylpyridin) (C≡C-C₆H₄-N(CH₃)₂-p)₂, Au(2-(p-tolyl)pyridin) (C≡C-C₆H₄-N(CH₃)₂-p)₂, Au(2-(p-methoxyphenyl)pyridin) (C≡C-C₆H₄-OCH₃-p)₂, Au(4-methyl-2-(p-methoxyphenyl)pyridin) (C≡C-C₆H₄-OCH₃-p)₂, Au(5-trifluormethyl-2-(p-methoxyphenyl)pyridin) (C≡C-C₆H₄-OCH₃-p)₂, Au(2-phenylpyridin) (C≡C-Si(CH₃)₃)₂, Au(2-(p-tolyl)pyridin) (C≡C-Si(CH₃)₃)₂, Au(2-phenylpyridin) (C≡C-H)₂, Au(2-phenylpyridin) (tolan-2,2'-diacetylid), Au(1-phenylisochinolin) (C≡C-C₆H₄-OCH₃-p)₂, Au(1-(p-methoxyphenyl)isochinolin) (C≡C-C₆H₄-OCH₃-p)₂ oder Au(7,8-benzochinolin) (C≡C-C₆H₄-OCH₃-p)₂ ist.

10. Leuchtelement umfassend eine Schicht, die die Gold(III)-Verbindung nach einem der Ansprüche 1 bis 9 enthält, wobei die Schicht Licht emittiert.

11. Leuchtelement nach Anspruch 10, wobei das Element eine Schichtstruktur aufweist, die eine Kathodenschicht, eine Elektronentransportschicht, eine die Gold(III)-Verbindung umfassende Schicht, eine Trägersperrschicht, eine Löchertransportschicht und eine Anodenschicht umfasst.

12. Verfahren zur Herstellung von lumineszierenden Gold(III)-Verbindungen nach Anspruch 2, umfassend: Bereitstellen eines Gold(III)-dichlorids, das mit einem Cyclometallatliganden oder Diiminliganden komplexiert wird, und Umsetzen des komplexierten Gold(III)-dichlorids mit einer starken σ-Donatorligandenvorstufe, wobei die lumineszierende Gold(III)-Verbindung nach Anspruch 2 gebildet wird.

13. Verfahren nach Anspruch 12, wobei der Diiminligand 2,2'-Bipyridin ist oder der Cyclometallatligand 2-Phenylpyridin, 2-(p-Tolyl)pyridin, 5-Methyl-2-(p-methoxyphenyl)pyridin, 2-(p-(tert-Butyl)phenyl)pyridin, Methoxyphenyl)pyridin, 4-Methyl-2-(p-methoxyphenyl)pyridin, 5-Trifluormethyl-2-(p-methoxyphenyl)pyridin, 1-Phenylisochinolin, 1-(p-Methoxyphenyl)isochinolin oder 7,8-Benzochinolin ist.

14. Verfahren nach Anspruch 12, wobei die starke σ-Donatorligandenvorstufe ein Metallalkynyl, Metallarylalkynyl, substituiertes Metallalkynyl oder substituiertes Metallarylalkynyl umfasst.

15. Verfahren nach Anspruch 14, wobei das substituierte Metallarylalkynyl LiC≡C-C₆H₄-OCH₃-p, LiCEC-C₆H₄-C₄H₉-p, LiC≡C-C₆H₄-C₂H₅-p, LiC≡C-C₆H₄-CF₃-p, LiC≡C-C₆H₄-NH₂-p, LiC≡C-C₆H₄-N(CH₃)₂-p oder LiC≡C-C₆H₄-C≡C-C₆H₄-C≡CLi umfasst oder das substituierte Metallalkynyl LiC≡C-Si(CH₃)₃ umfasst.

16. Verfahren nach Anspruch 12, wobei eine Reaktion in Lösung erfolgt.

17. Verfahren nach Anspruch 12, weiter umfassend: Reinigen der lumineszierenden Gold(III)-Verbindung durch Chromatographie, Sublimation, Kristallisation, Extraktion oder eine beliebige Kombination davon.

18. Verfahren zur Herstellung von lumineszierenden Gold(III)-Verbindungen nach Anspruch 3, umfassend:

Bereitstellen einer lumineszierenden Gold(III)-Verbindung, wobei A-B ein substituierter oder unsubstituierter Cyclometallatligand (für Y=C) oder Diiminligand (für Y=N) ist, wobei R₁ und/oder R₂ unabhängig substituiertes Alkynyl sind, wobei der Substituent als Schutzgruppe dient, und Entfernen der Schutzgruppe der lumineszierenden Gold(III)-Verbindung mit einem Schutzgruppenabspaltungsmittel, wobei die lumineszierende Gold(III)-Verbindung nach Anspruch 3 gebildet wird.

19. Verfahren nach Anspruch 18, wobei der Cyclometallatligand 2-Phenylpyridin ist.

20. Verfahren nach Anspruch 18, wobei die lumineszierende Gold(III)-Verbindung mit Schutzgruppe [Au(2-phenylpyridin) (C≡C-Si(CH₃)₃)₂] ist und das Schutzgruppenabspaltungsmittel Tetra-n-butylammoniumfluorid (TBAF) ist.

Es folgen 4 Blatt Zeichnungen

Anhängende Zeichnungen

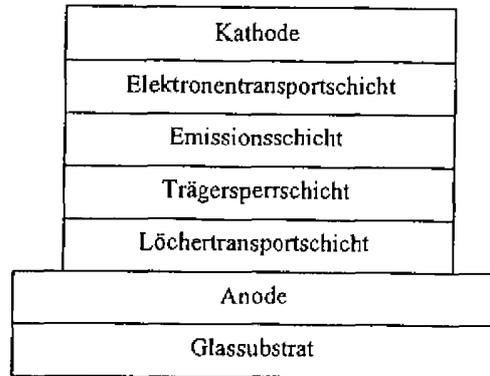


FIG. 1

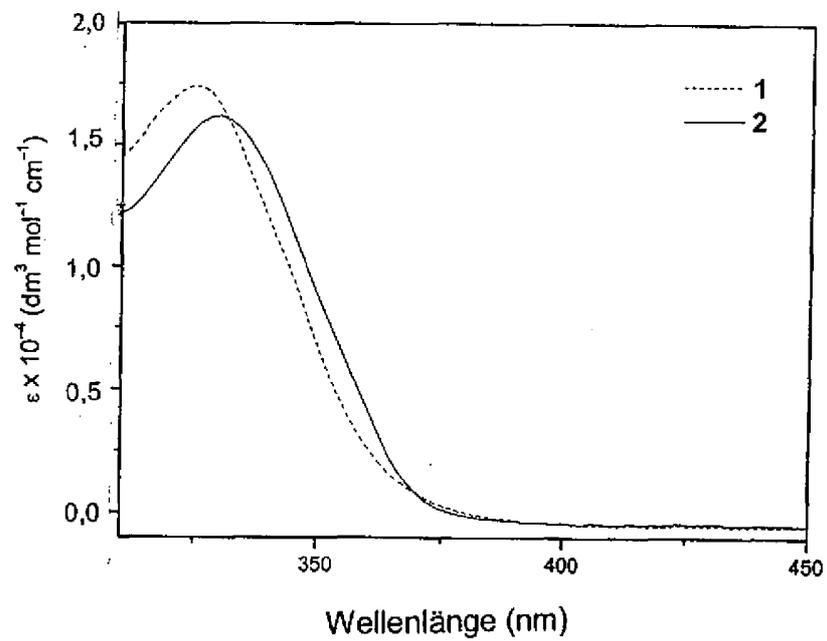


FIG. 2

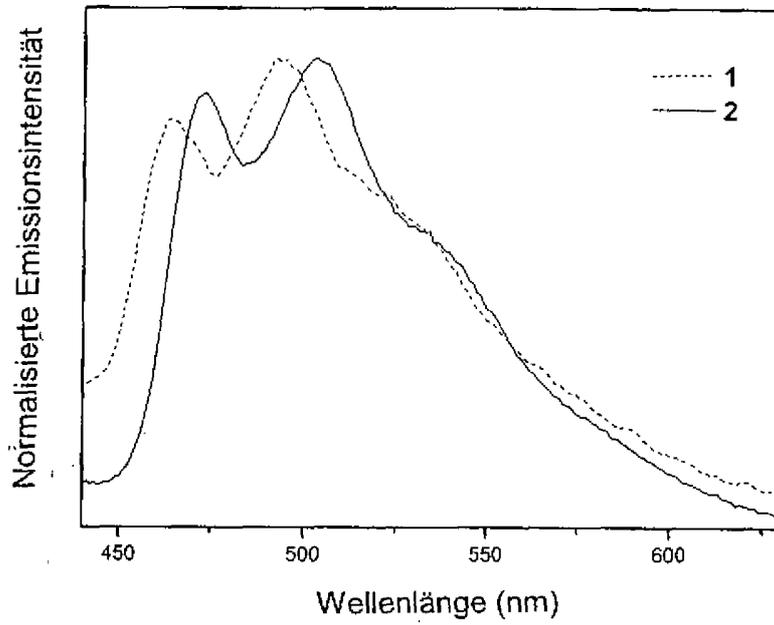


FIG. 3

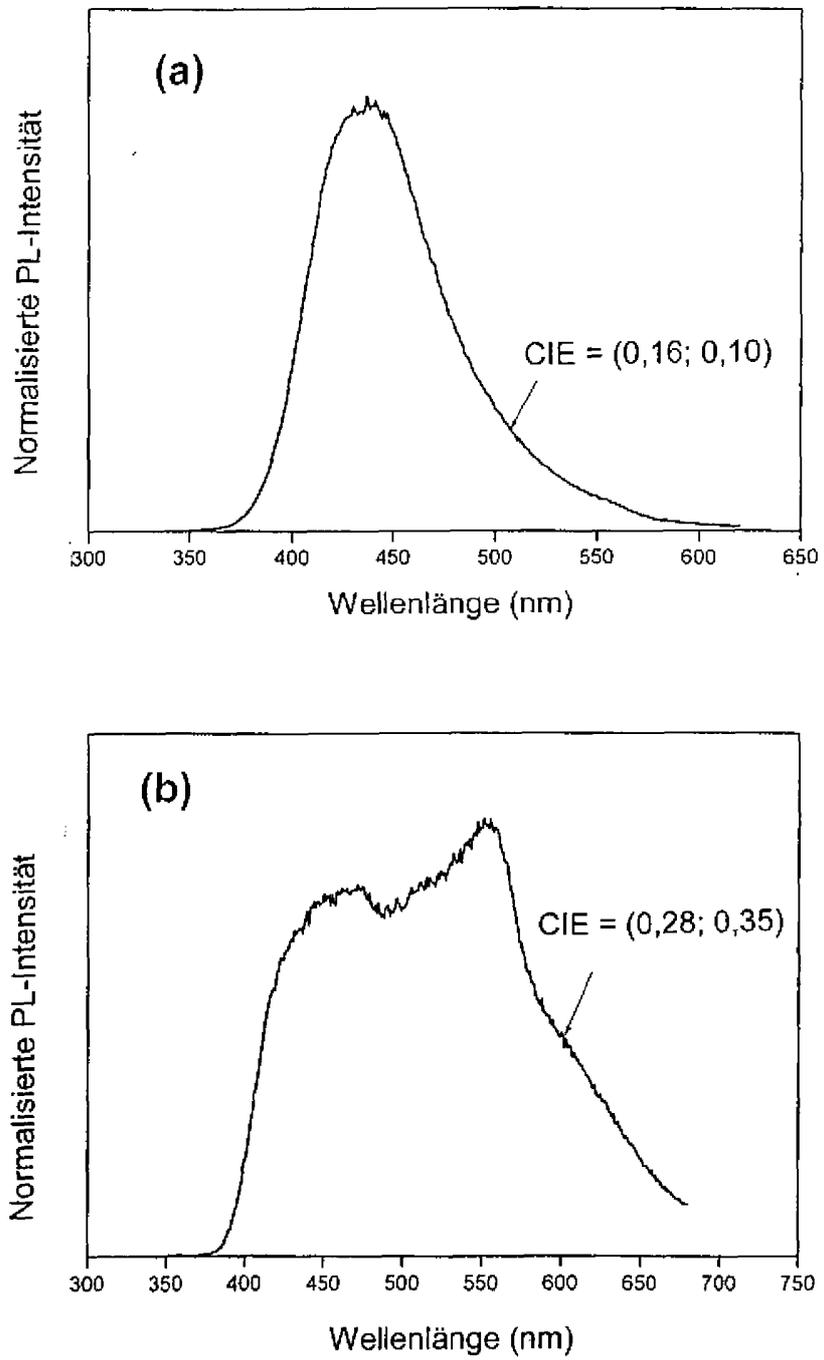


FIG. 4

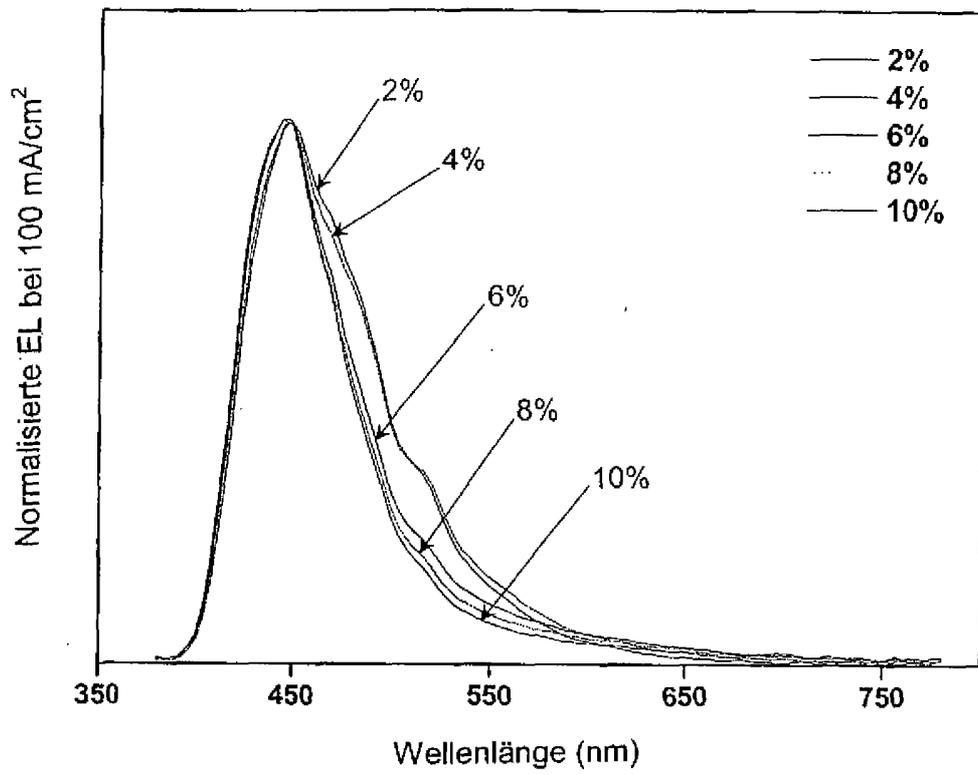


FIG. 5